Kvantemekanikk 2
Løsningsskisse eksamen 17.1.1997

Oppgave 1

a) Den stasjonære Schrödingerlikningen i spalten (dvs. uten veggpotensialet) er

$$H\psi = \frac{1}{2m}\left(\vec{p}+e\vec{A}\right)^2\psi = E\psi(\vec{r}).$$

Med det oppgitte vektorpotensial blir dette

$$\frac{1}{2m}\left[p_x^2 + (p_y + exB)^2 + p_z^2\right]\psi = E\psi.$$

Her er $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$, osv. Siden p_y og p_z kommuterer med H og med hverandre kan de ha felles egenfunksjoner. For p_y er e^{iky} en egenfunksjon, og der er ingen grensebetingelser som skal oppfylles i y-retning.

Egenfunksjonene for p_z er også eksponensialfunksjoner, eventuelt trigonometriske funksjoner, $\sin\kappa z$ og $\cos\kappa z$. I z-retning må grensebetingelsene ved de ugjennomtrengelige veggene, $\psi(z=0)=0$ og $\psi(z=L)=0$, oppfylles. Den første krever at $\sin\kappa z$ velges, den andre at $\sin(\kappa L)=0$, dvs $\kappa = n_z\pi/L$, med $n_z = 1,2,3,\ldots$.

Vi setter altså

$$\psi(x,y,z) = e^{iky}\,\sin(n_z\pi z/L)\,\phi(x),$$

og får ved innsetting i Schrödingerlikningen:

$$\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\hbar k + eBx)^2 + \frac{n_z^2\hbar^2\pi^2}{L^2}\right]\phi = E\phi.$$

Dette er et kvadratisk potensial. For å få det på standard form skifter vi nullpunktet for x. Med $q = x - x_0$, der

$$x_0 = -\frac{\hbar k}{eB},$$

og $\omega = eB/m$ blir dette

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2q^2\right]\phi = \left(E - \frac{n_z^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)\phi.$$

Hakeparentesen er Hamiltonoperatoren for en éndimensjonal harmonisk oscillator med energiegenverdier $(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$. Egenverdiene for elektronet i magnetfelt blir derfor

$$\underline{\underline{E = \frac{n_z^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} + (n+\tfrac{1}{2})\frac{\hbar eB}{m}}},$$

der $n_z = 1,2,3,\ldots$ og $n = 0,1,2,\ldots$.

b) Med periodiske grensevilkår i y-retning skal $\phi(y + L_y) = \phi(y)$. Det vil medføre at parameteren k må være en av verdiene $k = n_y 2\pi/L$, med heltallig n_y, som tilsvarer at

$$x_0 = -n_y \frac{h}{eBL_y}.$$

Degenerasjonen ytrer seg her ved at sentrum for oscillator-bølgefunksjonen kan være posisjonert på ulike steder i x-retning, med avstand $\Delta x = h/(eBL_y)$ mellom hver tillatt posisjon. I lengden L_x er det da $g = L_x/\Delta x$ mulige slike posisjoner:

$$g = \frac{e}{h} \cdot BL_yL_x = \frac{e}{h}\ \Phi = \underline{\underline{\frac{\Phi}{\Phi_0}}}$$

da fluksskvantet Φ_0 er h/e.

Oppgave 2

a) Det dominerende vekselvirkningsledd er $H_1' = \frac{e}{m}\vec{p}\vec{A}$. Andre vekselvirkningsledd er $H_2' = \frac{e^2\vec{A}^2}{2m}$ og $H_3' = (eg_S/2m)\vec{S}\vec{B}$.

H_1' og H_2' kommer av at en partikkel med ladning $(-e)$ har kinetisk energi

$$\frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + H_1' + H_2'$$

med strålingsfelt tilstede, og i Coulombjustering. H_3' representerer spinnets orienteringsenergi $-\vec{\mu}\vec{B}$ i ytre magnetfelt, med magnetisk moment $\vec{\mu} = -(eg_S/2m)\vec{S}$.

Elektrisk dipoltilnærmelsen betyr *fysisk* at atomets utstrekning er forsvinnende liten i forhold til feltets bølgelengde, og *regneteknisk* at $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}$ erstattes med 1 i matriseelementet.

Forbudt overgang: $\langle f|\vec{p}|i\rangle = 0$, ev. $\langle f|\vec{r}|i\rangle = 0$, dvs at overgangenssannsynligheten bli null i elektrisk-dipol-tilnærmelsen.

b) Integrasjon over alle retninger for $\vec{k}$, og summasjon over polarisasjonsmulighetene for fotonene gir

$$w_{i\to f}^{sp} = \int \sum_\lambda d\Gamma_{i\to f}.$$

Vi bruker $\langle f|\vec{r}|i\rangle \equiv \vec{r}_{fi}$ som polarakse, og legger én polarisasjonsvektor $\vec{e}_{\vec{k}1}$ i planet gjennom $\vec{k}$ og $\vec{r}_{fi}$. Den andre står da normalt på dette planet.

Da er

$$\vec{e}_{\vec{k}1} \cdot \vec{r}_{fi} = \sin\vartheta \quad \text{og} \quad \vec{e}_{\vec{k}2} \cdot \vec{r}_{fi} = 0,$$

som gir

$$\sum_\lambda d\Gamma_{i\to f} = \frac{\alpha\omega_{if}^3}{2\pi c^2}\,\sin^2\vartheta\,|\vec{r}_{fi}|^2 d\Omega.$$

Integrasjonen over retningene med $d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta d\varphi$ gir tilslutt

$$w_{i\to f}^{sp} = \frac{\alpha\omega_{if}^3}{2\pi c^2}|\vec{r}_{fi}|^2\, 2\pi\int_0^\pi \sin^3\vartheta\, d\vartheta = \underline{\frac{4}{3}\frac{\alpha\omega_{if}^3}{c^2}\,|\vec{r}_{fi}|^2}.$$

c) La oss velge (310) som $3p$-tilstand. Vi må finne frekvensen og beregne matriseelementet. (Vi ser bort fra forskjellen på redusert masse og elektronmasse.)

Frekvensen finner vi direkte av Balmerformelen:

$$\omega_{if} = \frac{E_{310} - E_{200}}{\hbar} = \left(-\frac{1}{3^2} + \frac{1}{2^2}\right)\frac{|E_{100}|}{\hbar} = \frac{5}{36}\frac{|E_{100}|}{\hbar}.$$

Matriseelementet er

$$\vec{M} = \langle\psi_{310}|\vec{r}|\psi_{200}\rangle = \vec{e}_z\int \psi_{310}\, r\cos\vartheta\, \psi_{200}\, 2\pi\sin\vartheta\, d\vartheta\, r^2\, dr,$$

da matriseelementet av $x = r\sin\vartheta\cos\varphi$ og av $y = r\sin\vartheta\sin\varphi$ blir null pga φ-integrasjonen. Da ψ_{310} inneholder en $\cos\vartheta$ - faktor blir vinkelintegrasjonen

$$\int_0^\pi \cos^2\vartheta\,\sin\vartheta\, d\vartheta = \tfrac{1}{3}\left[-\cos^3\vartheta\right]_0^\pi = \tfrac{2}{3}.$$

I den radielle integrasjonen er det greiere å bruke $\rho = r/a_0$ som integrasjonsvariabel i stedet for r. Vi må gjøre integralet

$$|\vec{M}| = \frac{a_0}{243}\int_0^\infty (6-\rho)(2-\rho)\rho^4 e^{-\rho/2-\rho/3}\, d\rho = \frac{a_0}{243}\int_0^\infty (12\rho^4 - 8\rho^5 + \rho^6)e^{-\frac{5}{6}\rho}\, d\rho =$$

$$\frac{a_0}{243}[12\cdot 4!(6/5)^5 - 8\cdot 5!(6/5)^6 + 6!(6/5)^7] = \tfrac{16}{27}(6/5)^6 a_0 = 1.769 a_0.$$

Etter innsetting av $|\vec{M}|$ kan overgangssannsynligheten skrives

$$w^{sp} = \tfrac{4}{3}\cdot 1.769^2\cdot\alpha\cdot\frac{c}{a_0}\left(\frac{\omega_{if}a_0}{c}\right)^3.$$

Vha

$$\frac{a_0\omega_{if}}{c} = \frac{5}{36}\left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\hbar c}\right) = \frac{5}{72}\alpha$$

og $c = 3 \cdot 10^8$m/s, $a_0 = 0.53 \cdot 10^{-10}$ m får vi

$$w^{sp} = \tfrac{4}{3} \cdot 1.769^2 \left(\tfrac{5}{72}\right)^3 \cdot \alpha^4 \cdot \frac{3 \cdot 10^8}{0.53 \cdot 10^{-10}} \text{ s}^{-1} = \underline{\underline{2.2 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}}}.$$

3p-tilstanden kan også gå med tillatt overgang til 1s-tilstanden, for det tilsvarer (som for 2s-tilstanden) $|\Delta l| = 1$ og $\Delta m = 0$.

d) Se på en ansamling av hydrogenatomer, og la det i middel være N_3 og N_2 atomer i de to nivåene vi ser på (Vi skriver for enkelthets skyld 3 og 2 i stedet for 310 og 200). I termisk likevekt vil forholdet mellom antallene være gitt ved en Boltzmann-faktor:

$$\frac{N_3}{N_2} = e^{-(E_3-E_2)/kT}.$$

På den annen side kan denne likevekten bare opprettholdes dersom

$$N_3\left(w^{sp}_{3\to2} + w^{ind}_{3\to2}\right) = N_2 w^{ind}_{2\to3}.$$

Da de to induserte overgangssannsynlighetene er like store får vi

$$\frac{w^{ind}}{w^{sp}} = \frac{N_3}{N_2 - N_3} = \frac{1}{e^{(E_3-E_2)/kT} - 1}.$$

Ved $T = 1000$ K er $kT = \frac{1000}{11600}$ eV =0.0862 eV. Og $E_3 - E_2 = \frac{5}{36}$ 13.6 eV = 1.889 eV. Det gir

$$\frac{w^{ind}_{3\to2}}{w^{sp}_{3\to2}} \doteq e^{-21.91} = \underline{\underline{3.05 \cdot 10^{-10}}}.$$

Ved denne temperaturen er altså indusert emisjon fullstendig neglisjerbar.

Oppgave 3

En størrelse er en bevegelseskonstant dersom operatoren for størrelsen kommuterer med Hamiltonoperatoren H. I dette tilfellet er

$$H = c\alpha_1 p_x + c\alpha_2 p_y + c\alpha_3 p_z + \beta mc^2.$$

x-komponenten av $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ er $L_x = yp_z - zp_y$, og x-komponenten av $\vec{S}$ er $S_x = (\hbar/2i)\alpha_2\alpha_3$. Vi trenger de grunnleggende relasjonene $[p_x, x] = \hbar/i$, osv, og at størrelsene $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ har kvadrat 1 og antikommuterer med hverandre. Det siste medfører at $\alpha_i\alpha_j$ kommuterer med β og med α_k, sålenge i, j, k er tre ulike tall. Derved ser en raskt at en del ledd kommuterer. De resterende leddene blir, når vi tar L_x og S_x hver for seg.

$$\begin{aligned} [H, L_x] &= [c\alpha_2 p_y, yp_z] - [c\alpha_3 p_z, zp_y] = -i\hbar c\alpha_2 p_z + i\hbar c\alpha_3 p_y && (1) \\ [H, S_x] &= [c\alpha_2 p_y, (\hbar/2i)\alpha_2\alpha_3] + [c\alpha_3 p_z, (\hbar/2i)\alpha_2\alpha_3] = -c\hbar i\alpha_3 p_y + c\hbar i\alpha_2 p_z && (2) \end{aligned}$$

I siste linje har vi brukt at $[\alpha_2, \alpha_2\alpha_3] = \alpha_2^2\alpha_3 - \alpha_2\alpha_3\alpha_2 = 2\alpha_3$ og tilsvarende $[\alpha_3, \alpha_2\alpha_3] = -2\alpha_2$.

Addisjon av (1 og (2) gir $[H, J_z] = 0$, som skulle bevises.

Oppgave 4

a) Vi tester om $\vec{J} = \vec{J}_1 - \vec{J}_2$ er en dreieimpulsoperator ved å beregne kommutatoren mellom to kartesiske komponenter. Siden $\vec{J}_1$ og $\vec{J}_2$ svarer til to ulike frihetsgrader kommuterer de med hverandre. Vi får

$$[J_x, J_y] = [J_{1x} - J_{2x}, J_{1y} - J_{2y}] = [J_{1x}, J_{1y}] + [J_{2x}, J_{2y}] = i\hbar(J_{1z} + J_{2z}) \neq i\hbar J_z$$

Altså er $\vec{J}_1 - \vec{J}_2$ *ikke* en dreieimpulsoperator.

b) Partikler med heltallig spinn er bosoner, partikler med halvtallig spinn er fermioner, så deutroner er bosoner. Da posisjonsbølgefunksjonen er symmetrisk må spinnfunksjonen også være *symmetrisk*.

Så til mulige spinnfunksjoner for topartikkelsystemet. Vi vet generelt at spinnverdien for topartikkelsystemet tar verdiene i heltallige skritt fra summen (S=1+1=2) av enkeltspinnverdiene til absoluttverdien av differansen ($S = |1 - 1| = 0$. Men fordi symmetrien er viktig her må vi se litt nøyere på det.

Det er ni mulige produkttilstander, og ordnet etter verdien på $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ er disse:

$$\begin{array}{cl}
\chi_1(1)\chi_1(2) & S_z = 2 \\
\chi_1(1)\chi_0(2),\ \ \chi_0(1)\chi_1(2) & S_z = 1 \\
\chi_0(1)\chi_0(2),\ \ \chi_1(1)\chi_{-1}(2),\ \ \chi_{-1}(1)\chi_1(2) & S_z = 0 \\
\chi_0(1)\chi_{-1}(2),\ \ \chi_{-1}(1)\chi_0(2) & S_z = -1 \\
\chi_{-1}(1)\chi_{-1}(2) & S_z = -2
\end{array}$$

Det er klart at produktet $\chi_1(1)\chi_1(2)$ med $S_z = 2$ svarer til $S = 2$. Mindre S_z-verdier for $S = 2$ kan fås ved å anvende stige-ned-operatoren

$$S_- = S_{1-} + S_{2-}.$$

Da S_- er symmetrisk vil symmetrien alltid være den samme for alle tilstander med en gitt S.

Av de to produktene som svarer til $S_z = 1$ kan vi lage én symmetrisk og én antisymmetrisk topartikkelfunksjon, nemlig

$$\chi_1(1)\chi_0(2) + \chi_0(1)\chi_1(2) \quad \text{og} \quad \chi_1(1)\chi_0(2) - \chi_0(1)\chi_1(2).$$

Den symmetriske må da høre til $S = 2$, den antisymmetriske til $S = 1$.

Av de tre produktene som svarer til $S_z = 0$ kan vi lage to symmetriske topartikkelfunksjoner, f.eks.

$$\chi_0(1)\chi_0(2) \quad \text{og} \quad \chi_1(1)\chi_{-1}(2) + \chi_{-1}(1)\chi_1(2),$$

(eller en lineærkombinasjon av disse), og én antisymmetrisk,

$$\chi_1(1)\chi_{-1}(2) - \chi_{-1}(1)\chi_1(2).$$

Den antisymmetriske må høre til $S = 1$, de symmetriske til $\underline{\underline{S = 2 \text{ og } S = 0}}$. Det er de to siste mulighetene som er relevante for vårt system av to bosoner.

c) Etter ovenstående er

$$\Xi_0(12) = A\chi_0(1)\chi_0(2) + B[\chi_1(1)\chi_{-1}(2) + \chi_{-1}(1)\chi_1(2)], \tag{3}$$

en eller annen overlagring av de to symmetriske funksjonene som tilsvarer $S = 0$. A og B er bestemt av at $\vec{S}^2\,\Xi_0 = 0$. Vi skriver

$$\vec{S}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1\vec{S}_2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1-}S_{2+} + S_{1+}S_{2-}$$

og får

$$\vec{S}^2\Xi_0 = 2(A + B)\hbar^2\,[2\chi_0(1)\chi_0(2) + \chi_1(1)\chi_{-1}(2) + \chi_{-1}(1)\chi_1(2)].$$

Altså er $B = -A$ i (3). Med normering får vi altså

$$\underline{\underline{\Xi_0(12) = \sqrt{1/3}\,[\chi_0(1)\chi_0(2) - \chi_1(1)\chi_{-1}(2) - \chi_{-1}(1)\chi_1(2)]}}.$$

Siste spørsmål er enkelt da

$$\vec{S}_1\vec{S}_2\,\Xi_0 = \tfrac{1}{2}\left(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right)\Xi_0 = \tfrac{1}{2}(0 - 2\hbar^2 - 2\hbar^2)\Xi_0 = \underline{\underline{-2\hbar^2\,\Xi_0}}.$$