Eksamen i fag 74326
Kvantemekanikk 2 den 28/11-97

Forslag til løsning.

Oppgave 1.

a) Schrödingerlikningen er

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\psi$$

Med $\psi = Af$ der $f = \exp\left(\pm\frac{i}{\hbar}\int^x p(y)\,dy\right)$ finner en

$$\psi' = A'f \pm \frac{i}{\hbar}p(x)Af$$

$$\psi'' = A''f \pm \frac{i}{\hbar}(2pA' + p'A)f - \frac{p^2}{\hbar^2}Af$$

som innsatt i Schrödingerlikningen gir

$$0 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(A'' \pm \frac{i}{\hbar}(2pA'+p'A) - \frac{p^2}{\hbar^2}A\right) + (V-E)A\right]f$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}A'' + \left(\frac{p^2}{2m}+V-E\right)A \mp \frac{\hbar^2}{2m}\frac{i}{\hbar}(2pA'+p'A)f$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}A'' \mp \frac{i\hbar}{2m}(2pA'+p'A)$$

der det gitte uttrykket for $p = p(x)$ er benyttet.
Så med feil til orden $\hbar^2$ har en

$$2pA' + p'A = 0$$

$$\frac{A'}{A} = -\frac{p'}{2p}$$

$$\ln A = -\tfrac{1}{2}\ln p \quad (+\,\text{konst})$$

$$\underline{\underline{A = \frac{1}{\sqrt{p}}}} \qquad \left[\text{evt. } \underline{\underline{A = \frac{\text{konst.}}{\sqrt{|p(x)|}}}}\right]$$

der $p(x) = \sqrt{2m(E-V)}$

b) Kvantiseringsbetingelsen framkommer ved at det mellom de klassiske vendepunktene skal være et heltallig antall n halve bølgelengder. Nå vil imidlertid WKB-løsningen være unøyaktig ved vendepunktene og bølgefunksjonen vil heller ikke være null ved disse (uten harde vegger). Dette krever en nøyere analyse som gir en spesiell løsning (Airy-funksjon). Ved å sammenholde denne med WKB-løsningen slik at de skjøter sammen finner man en fasevinkel $\pi/4$ fra nullpunktet ved hvert vendepunkt. Følgelig har en

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_v}^{x_h} p(y)\,dy = \pi n - 2\frac{\pi}{4} = \pi\left(n-\tfrac{1}{2}\right)$$

eller

$$2\int_{x_v}^{x_h} p(y)\,dy = 2\hbar\pi\left(n-\tfrac{1}{2}\right) = \left(n-\tfrac{1}{2}\right)h.$$

c) Fra kvantiseringsbetingelsen finner en

$$2\int_{x_v}^{x_h}\sqrt{2m(E-V(y))}\,dy = 2\cdot 2\sqrt{2mE}\int_0^{E/\alpha}\sqrt{1-\frac{\alpha}{E}y}\,dy$$

$$= 4\sqrt{2mE}\,\frac{E}{\alpha}\left[\left(-\frac{2}{3}\right)\left(1-\frac{\alpha}{E}y\right)^{3/2}\right]_0^{E/\alpha} = \frac{8}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\alpha}E^{3/2} = \left(n-\tfrac{1}{2}\right)h$$

$$\underline{\underline{E = \left[\frac{3\alpha}{8\sqrt{2m}}\left(n-\tfrac{1}{2}\right)h\right]^{2/3}}}$$

[For beregning av integralet er symmetrien om $y = 0$ benyttet.]

Oppgave 2.

a) Hamiltonoperatoren for elektron i strålingsfelt er

$$H = \frac{1}{2m}(\vec p + e\vec A)^2 - \vec\mu\vec B = \frac{1}{2m}p^2 + H_1' + H_2' + H_3'$$

der

$$H_1' = \frac{e}{m}\vec A\vec p$$
$$H_2' = \frac{e^2}{2m}\vec A^2$$
$$H_3' = -\vec\mu\vec B$$

der $\vec B = \nabla\times\vec A$. [$\vec p\vec A = \vec A\vec p$ p.g.a. Coulombbetingelsen $\nabla\vec A = 0$. Det siste leddet skyldes vekselvirkning med elektronets magnetiske moment $\vec\mu$.]

Leddet som bidrar i første ordens perturbasjonsteori er $\underline{H_1' = \frac{e}{m}\vec A\vec p}$.

b) For å bestemme $w_{i\to f}$ må en integrere over alle vinkler og summere over de 2 polarisasjonsretningene. Med $\vec M = \langle f|\vec r|i\rangle$ vil det være en vinkel θ_λ mellom $\hat e_{k\lambda}$ og $\vec M$ ($\lambda = 1,2$) slik at

$$\hat e_{k\lambda}\vec M = M\cos\theta_\lambda$$

Integrert over kuleflaten har en da

$$I_\lambda = \int |\hat e_{k\lambda}\vec M|^2 d\Omega = M^2\int_0^\pi \cos^2\theta_\lambda \sin\theta_\lambda\, d\theta_\lambda \int_0^{2\pi} d\varphi_\lambda$$

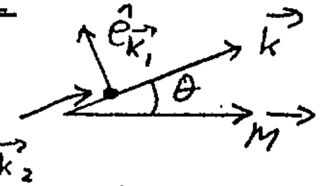
$$= M^2\cdot 2\pi\left[-\frac{1}{3}\cos^3\theta_\lambda\right]_0^\pi = \frac{4\pi}{3}M^2$$

Følgelig har en:

$$w_{i\to f} = \frac{\alpha\omega_{if}^3}{2\pi c^2}\sum_{\lambda=1,2} I_\lambda = \underline{\underline{\frac{4\alpha}{3c^2}\,\omega_{if}\, M^2}}$$

Dvs. $\quad a = \underline{\underline{\frac{4\alpha}{3c^2}}}$

[Alternativ utregning:



der $\hat e_{k_1}\vec M = -\vec M\sin\theta$ og $\hat e_{k_2}\vec M = 0$.

$$\sum_{\lambda=1,2} I_\lambda = I_1 = M^2\int \sin^2\theta\, d\Omega = M^2\int(1-\cos^2\theta)\,d\Omega = \frac{8\pi}{3}M^2.$$]

c) ω_{if} er bestemt av de 2 aktuelle energinivåene.

Dvs. $\hbar\omega_{if} = E_i - E_f$

$$\omega_{if} = \underline{\frac{1}{\hbar}(E_i - E_f)} \quad \left[= \frac{\pi^2\hbar}{2mL^2}(n_i^2 - n_f^2)\right]$$

For matriseelementet har en så

$$\langle f|z|i\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(k_f z)\, z\sin(k_i z)\, dz =$$

$$-\frac{1}{L}\int_0^L z\left[\cos(k_f+k_i)z - \cos(k_f-k_i)z\right]dz \underset{\text{delv. int.}}{=}$$

$$-\frac{1}{L}\left[z\left(\frac{\sin(k_f+k_i)z}{k_f+k_i} - \frac{\sin(k_f-k_i)z}{k_f-k_i}\right)\right]_0^L + \frac{1}{L}\int_0^L\left[\frac{\sin(k_f+k_i)z}{k_f+k_i} - \frac{\sin(k_f-k_i)z}{k_f-k_i}\right]dz = 0 - \frac{1}{L}\left[\frac{\cos(k_f+k_i)z}{(k_f+k_i)^2} - \frac{\cos(k_f-k_i)z}{(k_f-k_i)^2}\right]_0^L$$

$$= \frac{1}{L}\left[\frac{1-(-1)^{n_+}}{(k_f+k_i)^2} - \frac{1-(-1)^{n_-}}{(k_f-k_i)^2}\right] = \begin{cases} \underline{\underline{\frac{2L}{\pi^2}\left[\frac{1}{(n_f+n_i)^2} - \frac{1}{(n_f-n_i)^2}\right]}} \\ \underline{\underline{0}}, \quad n_\pm = n_f \pm n_i \text{ er partall} \end{cases}$$

Øverste svar gjelder når $n_\pm = n_f - n_i$ er oddetall. Innsatt gir dette $w_{i\to f} = a\,\omega_{if}^3|\langle f|z|i\rangle|^2$

Oppgave 3.

a) Med $s=0$ må også z-komponenten av det resulterende spinnet være lik 0, dvs. kvantetall $m=0$. Alle leddene i ψ_0 er egentilstander til z-komponenten $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ av det totale spinnet med egenverdiparameter som da må være $m = m_1 + m_2 = 0$. Følgelig er $m_1 = -m_2$ slik at vi må ha

$$\psi_0 = a(|1\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|1\rangle) + b\,|0\rangle|0\rangle$$

der de 2 første leddene har samme koeffisient p.g.a. symmetri. [Evt. kunne disse 2 leddene ha motsatt fortegn (antisymmetri).]

Ved å innføre stigeoperatorene $(J_\pm \to S_\pm)$ har en så

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

som gir

$$S_{i+}|1\rangle = 0,\quad S_{i-}|1\rangle = \sqrt{2}\hbar|0\rangle$$
$$S_{i+}|0\rangle = \sqrt{2}\hbar|1\rangle,\quad S_{i-}|0\rangle = \sqrt{2}\hbar|-1\rangle$$
$$S_{i+}|-1\rangle = \sqrt{2}\hbar|0\rangle,\quad S_{i-}|-1\rangle = 0$$

Videre med $s_i = 1$ har en egenverdiene til $\vec{S}_i^2$ som er $s_i(s_i+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$ $(i=1,2)$. Med totalt spin $s=0$ har en dermed

$$\vec{S}^2|\psi_0\rangle = \hbar^2\left[a(2+2+2\cdot 1\cdot(-1)) + b((\sqrt{2})^2+0)\right](|1\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|1\rangle)$$
$$+\left[((\sqrt{2})^2+0+(\sqrt{2})^2+0)a + (2+2+0)b\right]|0\rangle|0\rangle =$$
$$2\hbar^2(a+b)\left[|1\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|1\rangle + 2|0\rangle|0\rangle\right] = 0$$

Av dette finner en dermed $b=-a$. Da

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

blir normeringen [bortsett fra evt. fasefaktor]

$$a = \frac{1}{\sqrt{3}}\quad b = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$

slik at

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|1\rangle - |0\rangle|0\rangle)$$

b) Fra $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ finner en

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1\vec{J}_2$$

eller

$$2\vec{J}_1\vec{J}_2 = \vec{J}^2 - \vec{J}_1^2 - \vec{J}_2^2$$

Energinivåene er følgelig bestemt av egenverdiene til $\vec{J}^2$, $\vec{J}_1^2$ og $\vec{J}_2^2$. Følgelig finner en

$$H = \alpha\,\vec{J}_1\vec{J}_2 = \frac{1}{2}\alpha(\vec{J}^2 - \vec{J}_1^2 - \vec{J}_2^2)$$

som gir egenverdiene

$$E_j = \frac{1}{2}\alpha\left(j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)\right)\hbar^2$$

der

$$j = j_{min}, j_{min}+1, j_{min}+2, \ldots, j_{maks}$$
$$j_{min} = |j_1 - j_2| \quad\text{og}\quad j_{maks} = j_1 + j_2$$

Degenerasjonen g_j til hvert energinivå følger av de $2j+1$ mulige verdiene til z-komponenten til den totale dreieimpulsen $\vec{J}$. Altså

$$g_j = 2j+1$$

Oppgave 4.

a) Kvadrering gir

$$mc^2 + p^2 = (\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc)^2 = (\alpha_i p_i)^2 \quad (\textstyle\sum_i,\ p_0 = mc)$$

eller

$$mc^2 + p^2 = p_i p_i = \alpha_i \alpha_j p_i p_j = \tfrac{1}{2}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i) p_i p_j$$

For likhet må en derfor ha

$$\underline{\underline{\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}}} \quad (i,j = 0,1,2,3)$$

b) Ved kvadrering og sammenlikning har en $(i = 1,2,3)$

$$H^2 = (c\vec{\alpha}\vec{D} + \beta mc^2)^2 = (mc^2 + H_0)^2$$

$$c^2(\alpha_i D_i)(\alpha_j D_j) + (mc^2)^2 = (mc^2)^2 + 2mc^2 H_0 + H_0^2$$

(da $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$). For små H_0 har en fra dette

$$H_0 = \frac{1}{2m}\alpha_i\alpha_j D_i D_j$$

Nå kommuterer ikke D_i og D_j $(i \neq j)$ da p_i og A_j ikke kommuterer. En får da videre (ved bytte av indekser i og j)

$$\alpha_l\alpha_j D_l D_j = \tfrac{1}{2}(\alpha_l\alpha_j D_l D_j + \alpha_j\alpha_l D_j D_l) =$$

$$\tfrac{1}{2}(\alpha_l\alpha_j + \alpha_j\alpha_l) D_l D_j + \alpha_j\alpha_l [D_j, D_l] =$$

$$\delta_{lj} D_l D_j + \alpha_j\alpha_l [p_j + eA_j, p_l + eA_l] =$$

$$D_i D_i + e\,\alpha_j\alpha_l \{[p_j, A_l] + [A_j, p_l]\} =$$

$$\vec{D}^2 + e\frac{\hbar}{i}\alpha_j\alpha_l\left(\frac{\partial A_l}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_l}\right) =$$

$$\vec{D}^2 + e\frac{\hbar}{i}\frac{2i}{\hbar}\varepsilon_{jlk} S_k\left(\frac{\partial A_l}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_l}\right) =$$

$$\vec{D}^2 + 2e\,\vec{S}(\nabla\times\vec{A}) = \vec{D}^2 + 2e\,\vec{S}\vec{B}$$

der oppgitte $\alpha_j\alpha_l = \frac{2i}{\hbar}\varepsilon_{jlk} S_k$ er benyttet i tillegg til relasjonen $\vec{B} = \nabla\times\vec{A}$. Så alt i alt

$$\underline{\underline{H_0 = \frac{1}{2m}\vec{D}^2 + \frac{e}{m}\vec{S}\vec{B}}}$$

Elektronets magnetiske moment er følgelig

$$\vec{\mu} = \underline{\underline{-\frac{e}{m}\vec{S}}}$$