Eksamen i fag 74326
Kvantemekanikk 2, den 28/11-98.

Forslag til løsning.

①

Oppgave 1.

a/ $V(\vec{r})$ er det effektive potensialet som skyldes vekselvirkningen fra ytre potensial og partiklene selv. ε_F er Fermienergien ved $T=0$ og ξ er en konstant slik at maksimalenergien til partiklene ved likevekt er konstant over systemet. Denne likevekten bestemmes av den første likningen. Den andre likningen bestemmer potensialet ifølge elektrostatikk der e er elementærladningen og ε_0 er permeabilitet for vakuum. ρ er ladningstettheten med et tidrag fra elektronene selv pluss andre tidrag.

b) med ξ = konst vil ε_F og dermed partikkeltettheten n variere med $V(\vec{r})$. Ved å differensiere oppgitt uttrykk finner en da ($\Delta\varepsilon_F = \varepsilon_F - \xi$)

$$V(\vec{r}) = -\Delta\varepsilon_F = -\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}\frac{1}{n^{1/3}}\,\frac{2}{3}\,\Delta n$$

som gir

$$\Delta n = -aV(\vec{r})$$

der

$$a = \underline{\underline{\frac{3m}{\hbar^2}\frac{n^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}}}} = \underline{\underline{\frac{12m}{h^2}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3}n^{1/3}}}$$

c/ Ladningstettheten er gitt ved

$$\rho = -e\Delta n + \rho_a$$

der andre ladninger ρ_a gir potensialet V_a, dvs.

$$\nabla^2 V_a = \frac{e}{\varepsilon_0}\rho_a$$

Fra dette finner en så

$$\nabla^2 V = \frac{e}{\varepsilon_0}(-e\Delta n + \rho_a) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0}\Delta n + \nabla^2 V_a$$

$$\nabla^2(V - V_a) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0}\Delta n = \lambda^2 V$$

med $\lambda^2 = \frac{e^2}{\varepsilon_0}a$ når en setter inn for Δn.
Det effektive potensialet bestemmes ved å sette inn i differensiallikningen og en finner

$$\frac{d^2}{dx^2}(V - V_a) = \lambda^2 V$$

$$-k^2(b-1)\gamma\sin kx = \lambda^2 b\,\gamma\sin kx$$

$$k = b(k^2+\lambda^2)$$

$$\underline{\underline{b = \frac{k^2}{k^2+\lambda^2}}} \quad \text{med } \underline{\underline{\lambda^2 = \frac{e^2}{\varepsilon_0}a}}$$

(der a er som funnet under pkt a.)

Oppgave 2

a) x-komponenten blir

$$S_x = \frac{\hbar}{4i}\left(\varepsilon_{231}\alpha_2\alpha_3 + \varepsilon_{321}\alpha_3\alpha_2\right) = \frac{\hbar}{4i}\left(\alpha_2\alpha_3 - \alpha_3\alpha_2\right)$$

$$= \frac{\hbar}{4i}\left(\alpha_2\alpha_3 + (\alpha_2\alpha_3 - 2\delta_{23})\right) = \underline{\underline{\frac{\hbar}{2i}\alpha_2\alpha_3}}$$

når relasjonene for α_i $(i=1,2,3)$ benyttes. Tilsvarende finner en ved sykliske ombytte av x, y og z.

$$S_y = \underline{\underline{\frac{\hbar}{2i}\alpha_3\alpha_1}} \quad \text{og} \quad S_z = \underline{\underline{\frac{\hbar}{2i}\alpha_1\alpha_2}}$$

Ved videre å benytte relasjonene for α_i finner en

$$[S_y, S_z] = S_y S_z - S_z S_y = \left(\frac{\hbar}{2i}\right)^2\left[\alpha_3\alpha_1\alpha_1\alpha_2 - \alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_1\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4}(\alpha_3\alpha_2 - \alpha_2\alpha_3) = \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{2}\alpha_2\alpha_3}} = i\hbar\frac{\hbar}{2i}\alpha_2\alpha_3 = \underline{\underline{i\hbar S_x}}$$

$$S_x^2 = \left(\frac{\hbar}{2i}\right)^2(\alpha_2\alpha_3\alpha_2\alpha_3) = -\frac{\hbar^2}{4}\alpha_2(-\alpha_2\alpha_3)\alpha_3 = \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{4}}}$$

b) En har at $[\beta mc^2, \vec{S}] = 0$

da β kommuterer med 2 faktorer α_i, dvs $\beta\alpha_i\alpha_j = -\alpha_i\beta\alpha_j = (-\alpha_i)(-\alpha_j\beta) = \alpha_i\alpha_j\beta$. En finner så

$$[H, \vec{S}] = \frac{\hbar c}{4i}[\vec{\alpha}\vec{p}, \vec{S}] = \frac{\hbar c}{4i}\Big[\alpha_n p_n \varepsilon_{jlk}\alpha_j\alpha_l\hat{e}_k$$

$$- \varepsilon_{jlk}\alpha_j\alpha_l\hat{e}_k\alpha_n p_n\Big] = \underline{\frac{\hbar c}{4i}p_n\hat{e}_k\varepsilon_{jlk}\left[\alpha_n\alpha_j\alpha_l - \alpha_j\alpha_l\alpha_n\right]}$$

Ombytte av α-matrisene gir videre

$$\alpha_n\alpha_j\alpha_l = (2\delta_{nj} - \alpha_j\alpha_n)\alpha_l = 2\delta_{nj}\alpha_l - \alpha_j(2\delta_{nl} - \alpha_l\alpha_n)$$

$$= 2\delta_{nj}\alpha_l - 2\delta_{nl}\alpha_j + \alpha_j\alpha_l\alpha_n$$

Innsatt finner en dermed

$$[H, \vec{S}] = \frac{\hbar c}{4i}p_n\hat{e}_k\varepsilon_{jlk}\cdot 2\left[\delta_{nj}\alpha_l - \delta_{nl}\alpha_j\right]$$

$$= \frac{\hbar c}{2i}p_n\hat{e}_k\left[\varepsilon_{nlk}\alpha_l - \varepsilon_{jnk}\alpha_j\right] =$$

$$\frac{\hbar c}{2i}\left[\vec{p}\times\vec{\alpha} - \vec{\alpha}\times\vec{p}\right] = \underline{\underline{i\hbar c(\vec{\alpha}\times\vec{p})}}$$

Iog med at $\vec{p}\left(=\frac{\hbar}{i}\nabla\right)$ kommuterer med både H og $\vec{S}$ finner en enkelt fra ovenstående at $\vec{S}\vec{p}$ kommuterer med H idet

$$[H, \vec{S}\vec{p}] = [H, \vec{S}]\vec{p} = i\hbar c(\vec{\alpha}\times\vec{p})\vec{p} = \underline{\underline{0}}$$

$$(= i\hbar c\,\varepsilon_{jlk}\alpha_j p_l p_k)$$

Oppgave 3.

a) Begynnelses- og sluttilstanden kan skrives som

$$|i\rangle = |\psi_i\rangle|\cdots, n_{\vec{k}\lambda}, \cdots\rangle$$
$$|f\rangle = |\psi_f\rangle|\cdots; n_{\vec{k}\lambda}+1, \cdots\rangle$$

Med uttrykket for $\vec{A}$ innsatt blir operatoren for perturbasjonen

$$H_1' = \frac{e}{m}\sum_{\vec{k}\lambda} C_k\left(a_{\vec{k}\lambda}e^{i\vec{k}\vec{r}} + a^+_{k\lambda}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right)\hat{e}_{\vec{k}\lambda}\vec{p}$$

Operatorene $a_{\vec{k}\lambda}$ og $a^+_{\vec{k}\lambda}$ virker på fotontilstandene og for å generere et foton må $a^+_{\vec{k}\lambda}$ anvendes. En finner da

$$a^+_{\vec{k}\lambda}|\cdots, n_{\vec{k}\lambda}, \cdots\rangle = \sqrt{n_{\vec{k}\lambda}+1}\,|\cdots, n_{\vec{k}\lambda}\cdots\rangle$$

Skalarproduktet av de 2 fotontilstandene gir dermed en faktor

$$\langle\cdots, n_{k\lambda}+1, \cdots|\, a^+_{\vec{k}\lambda}|\cdots, n_{\vec{k}\lambda}, \cdots\rangle = \sqrt{n_{\vec{k}\lambda}+1}$$

Når et enkelt foton betraktes vil bare et ledd i summen ovenfor bidra. Matriseelementet blir derfor

$$M_{fi} = \langle f|H'|i\rangle = \underline{B\,\langle\psi_f|e^{-i\vec{k}\vec{r}}\vec{p}|\psi_i\rangle\hat{e}_{\vec{k}\lambda}}$$

$$\text{der } \underline{\underline{B = \frac{e}{m}C_k\sqrt{n_{\vec{k}\lambda}+1}}}$$

Ved spontane overganger er ingen fotoner tilstede på forhånd, dvs da er $n_{\vec{k}\lambda}=0$ eller $\underline{\underline{B=\frac{e}{m}C_k}}$.

Elektrisk-dipol tilnærmelsen er å erstatte faktoren $e^{-i\vec{k}\vec{r}}$ med 1 i uttrykket for M_{fi}. Dette kan gjøres med god tilnærmelse for bølgelengde som er mye større enn atomets størrelse slik at $kr \ll 1$ ($k = 2\pi/\lambda$) ved utregning av matriseelementet

b) Total overgangssannsynlighet er gitt ved

$$w_{i\to f} = \sum_\lambda\int P_{i\to f}\frac{V}{(2\pi)^3}d\vec{k} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_\lambda\int|M_{fi}|^2\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_k) \times\frac{V}{(2\pi)^3}d\vec{k}$$

Innfører så kulekoordinater med volumelementet

$$d\vec{k} = d\Omega\, k^2 dk$$

For å integrere δ-funksjonen trenger en sammenhengen $\omega_k = ck$ mellom frekvens og bølgetall. Videre kan en skrive

$$\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_k) = \delta(\hbar\omega_{if}-\hbar ck) = \frac{1}{\hbar c}\delta\left(\frac{\omega_{if}}{c}-k\right)$$

der $\omega_{if} = \underline{(E_i-E_f)/\hbar}$

er frekvensen på det utsendte fotonet. Integrering gir så

$$\int\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_k)k^2dk = \frac{1}{\hbar c}\int\delta\left(\frac{\omega_{if}}{c}-k\right)k^2dk = \underline{\frac{1}{\hbar c}\left(\frac{\omega_{if}}{c}\right)^2}$$

Så alt i alt finner en

$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_\lambda\int|M_{fi}|^2\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{1}{\hbar c}\left(\frac{\omega_{if}}{c}\right)^2 d\Omega$$

$$= \underline{\sum_\lambda D\int|M_{fi}|^2 d\Omega}$$

$$\text{der } D = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{1}{\hbar c}\left(\frac{\omega_{if}}{c}\right)^2 = \underline{\underline{\frac{V\,\omega_{if}^2}{4\pi^2\hbar^2c^3}}}$$

Oppgave 4.

a/ Born-Oppenheimer metoden går ut på å forenkle et generelt komplisert kvantemekanisk problem ved å skille bevegelsen til de mye tyngre atomkjernene fra de lette elektronene. Atomkjernene tenkes da liggende i ro mens en løser elektronproblemet. Energien (egenverdiene) til det siste problemet kan da brukes som et potensial (som varierer med atomavstander) i det første. [Deretter kan minima i det siste gi stabile molekylkonfigurasjoner det atomene vibrerer om likevekt. Det funne potensialet kan så brukes til å løse det kvantemekaniske problemet for kjernene (i den grad avvik fra harmonisk potensial er av betydning).]

b/ Med X fast vil V bli et potensial for en enkelt harmonisk oscillator der origo er forskjøvet. En finner

$$V = \frac{1}{2}\left[AX^2 + C\left(x^2 + 2\frac{B}{C}Xx\right)\right] = \underline{\frac{1}{2}\left[\left(A - \frac{B^2}{C}\right)X^2 + C\left(x + \frac{B}{C}X\right)^2\right]}$$

Med X fast er altså origo for den lette partikkelen i posisjonen $x_0 = \frac{B}{C}X$. Ved så å sammenlikne med standardformen $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ for harmonisk oscillator ser en at egenfrekvensen blir

$$m\omega^2 = C$$

$$\omega = \underline{\underline{\sqrt{C/m}}}$$

Energien til den lette partikkelen [$E_n = \hbar\omega(\frac{1}{2}+n)$] er uavhengig av X i leddet $C(x-x_0)^2$ (da valg av origo $x_0 = \frac{B}{C}X$ ikke påvirker denne). Potensialet til den tunge partikkelen blir følgelig

$$V = \frac{1}{2}\left(A - \frac{B^2}{C}\right)X^2 + \text{konst.}$$

som igjen er en harmonisk oscillator med egenfrekvensen bestemt av

$$M\Omega^2 = A - \frac{B^2}{C}$$

$$\Omega = \underline{\underline{\sqrt{\frac{1}{M}\left(A - \frac{B^2}{C}\right)}}}$$