NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK
Faglig kontakt under eksamen:
Martin Grønsleth, tlf 93772

EKSAMEN I TFY4210 ANVENDT KVANTEMEKANIKK
Mandag 23. mai, 2005
09.00-13.00

Tillatte hjelpemidler :	K.Rottman, Matematisk formelsamling
	Godkjent kalkulator
Vekttall :	2.5
Språkform :	Bokmål
Antall sider :	8
Sensurdato :	13.juni

- Oppgave settet inneholder 3 oppgaver, med til sammen 10 deloppgaver. Hver deloppgave teller likt ved sensur.
- Bak oppgave settet finner du et vedlegg på to sider med formler som det kan, men ikke nødvendigvis vil, være bruk for. Kandidaten må tolke symbolene i oppgitte formler.
- Les hver oppgave nøye!

Oppgave 1

Den såkalte Dresselhaus Hamilton-operatoren for et elektron med masse m som kan bevege seg i (x, y)-planet med spinn-bane kobling inkludert, er gitt ved Schrödinger-ligningen

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \gamma(\sigma_1\ p_x - \sigma_2\ p_y)\right]\psi = E\psi,$$

hvor ψ er en to-komponent spinor gitt ved

$$\psi = N\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\ \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix},$$

og N er en normaliseringkonstant. Videre er σ_1 og σ_2 Pauli-matriser (i standard notasjon), og γ er en dimensjonsbeheftet konstant.

a) Vis at energiene til systemet er gitt ved

$$E_s = \frac{\hbar^2}{2m}\left[(k_\perp + sk_D)^2 - k_D^2\right]; \quad s = \pm 1,$$

hvor $k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Bestem derved k_D.

b) Finn egentilstandene ψ_s $(s = \pm 1)$ til systemet. Normaliser disse tilstandene og bestem derved N.

c) Beregn

$$\langle\sigma_3\rangle \equiv \langle\psi_s|\sigma_3|\psi_s\rangle$$

i tilstandene ψ_s. Avgjør også hvorvidt disse tilstandene respekterer tidsinversjons-symmetri. (Hint: Tidsinversjon er definert ved transformasjonene $t \to -t, \mathbf{k} \to -\mathbf{k}, i \to -i, s \to -s$.)

Oppgave 2

Den stasjonære Dirac-ligningen for et elektron med masse m og ladning e i et generelt elektromagnetisk felt $A_\mu = (\phi/c, \mathbf{A})$, der $(\phi, \mathbf{A})$ er henholdsvis et skalarpotensial og et vektorpotensial, er gitt ved

$$[E - e\phi]\,\psi = \left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \beta mc^2\right]\psi$$

a) Vis direkte fra den generelle Dirac-ligningen at

$$\psi_b = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A})}{2mc}\psi_a$$

i ikke-relativistisk grense. Her er c lyshastigheten og ψ en 4-komponent spinor, gitt ved de store komponentene (ψ_a) og små komponentene (ψ_b) på formen

$$\psi \;=\; \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = N\; e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \; \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \end{pmatrix},$$

hvor u_a og u_b begge er to-komponent spinorer og N er en normaliserings-faktor.

Dirac-ligningen kan omformes til en Klein-Gordon ligning (en korrekt relativistisk bølgeligning for spinnløse partikler) pluss to spinn-avhengige ledd (da elektronet har spinn) på formen (dette skal ikke vises!)

$$\left[(E - e\phi)^2 - (mc^2)^2 - c^2(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + c^2 e\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{B} - ie\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}\right]\psi = 0.$$

De tre første leddene er Klein-Gordon ligningen, og de to siste leddene beskriver elektron-spinnet sin kobling til det elektromagnetiske feltet.

b) Vis at når korreksjonene til laveste orden i $\mathbf{B}$ og $\mathbf{E}$ til ikke-relativistisk grense av Klein-Gordon ligningen inkluderes, er Schrödinger-ligningen gitt ved

$$H\psi = E\psi,$$

der

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + e\phi - \frac{e\hbar}{2m}\,\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{B} + \frac{ie\hbar}{2mc}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E},$$

når hvile-energien mc^2 er trukket fra den totale energien. Det første spinn-avhengige leddet er et Zeeman-ledd som overlever i ikke-relativistisk grense $c \to \infty$ (da lyshastigheten c ikke opptrer), mens det siste leddet er ledende ordens relativistiske korreksjon.

Tidsinversjon er gitt ved transformasjonene $t \to -t, \mathbf{k} \to -\mathbf{k}, i \to -i$. Avgjør hvorvidt de to siste spinn-avhengige leddene er invariante under tidsinversjon eller ikke. (Hint: **B** og **E** kan antas å være eksterne felt som er invariante under tidsinversjon. Spinnet transformerer som en dreie-impuls operator).

c) Sett $\mathbf{A} = \mathbf{B} = 0$ og bruk resultatene fra **a**) og **b**) til å skrive Dirac-ligningen med ledende ikke-relativistiske korreksjon i **E** som følgende Schrødinger-ligning for den store (partikkel-like) komponenten ψ_a

$$\left[\frac{p^2}{2m} + e\phi + \eta[(-e\boldsymbol{\nabla}\phi) \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}\right] \psi_a = E\psi_a,$$

og bestem derved η.

d) Vi spesifiserer nå skalarpotensialet ϕ til å være

$$\phi = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r}.$$

Skriv ned H i **c**) eksplisitt i dette tilfellet og gi derved en fysisk tolkning av det spinn-avhengige leddet.

Oppgave 3

Et kvantemekanisk system av spinnløse fermioner på et tre-dimensjonalt kubisk gitter, i kontakt med et eksternt partikkel reservoar, er definert ved Hamiltonoperatoren

$$H = t \sum_{<i,j>} c_i^\dagger c_j + U \sum_{<i,j>} n_i \; n_j - \mu \sum_i n_i$$

Her er $(c_i^\dagger, c_i)$ kreasjons- og destruksjonsoperatorer for spinnløse fermioner på gitterpunkt i, og $n_i = c_i^\dagger c_i$. Operatorene tilfredsstiller fermion anti-kommutator relasjoner

$$\begin{aligned} c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i &= \delta_{ij} \\ c_i c_j + c_j c_i &= 0 \\ c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger &= 0 \end{aligned}$$

Videre er t et tunnelerings matrise-element som vi regner som positivt, $U < 0$ er en *nærmeste-nabo* attraktiv elektrostatisk vekselvirkning mellom fermioner på det to-dimensjonale kvadratiske gitteret, og μ er et kjemisk potensial som regulerer midlere antall partikler på gitteret. Systemet har føringsbetingelsen at det ikke kan befinne seg mer enn ett fermion på hvert gitterpunkt.

Systemet over kan transformeres til en Heisenberg modell for en magnetisk isolator ved å innføre spinn-operatorer for $S = 1/2$ spinn som følger

$$\begin{aligned} c_i^\dagger &= S_i^{(+)} \\ c_i &= S_i^{(-)} \\ n_i &= \frac{1}{2} + S_{iz} \\ S_i^{(\pm)} &= S_x \pm i S_y \end{aligned}$$

Her er z en spinn-kvantiserings retning perpendikulært på (x, y)-planet. S_{ix}, S_{iy}, S_{iz} er x, y, z-komponenter av $S = 1/2$ spinn operatorer.

a) Finn kommutator-relasjonene til spinn-operatorene $S_{iz}, S_i^{(\pm)}$ ved å bruke antikommutator-relasjonen for fermion operatorene.

b) Vi at H kan skrives som en anisotrop Heisenberg modell i ytre magnetfelt, på formen

$$H = E_0 - J \sum_{<i,j>} \left[S_{iz} \; S_{jz} + \Delta \; S_i^{(+)} \; S_i^{(-)} \right] - h \sum_i S_{iz}$$

og bestem ved dette parametrene E_0, J, Δ, h ved hjelp av parametrene t, U, μ og Z, N, hvor Z er antallet nærmeste naboer på gitteret, og N er totalt antall gitterpunkt i systemet.

c) Bosoniser dette systemet ved å innføre Holstein-Primakoff transformasjonen

$$\begin{aligned} S_{iz} &= \frac{1}{2} - a_i^\dagger a_i \\ S_i^{(+)} &= \left(1 - a_i^\dagger a_i\right)^{1/2} \ a_i \\ S_i^{(-)} &= a_i^\dagger \ \left(1 - a_i^\dagger a_i\right)^{1/2} \end{aligned}$$

hvor $a_i^\dagger, a_i$ er kreasjons- og destruksjons operatorer for kvantiserte spinn-bølger (magnoner). Regn til laveste orden i magnon-operatorene og finn energien ω_q til magnonene, definert ved

$$H = H_0 + \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q$$

der

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \ a_q \ e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r_i}}$$

hvor $\mathbf{r_i}$ er posisjonen til en partikkel på gitterpunkt nummer i. Angi H_0 og bestem den verdien på Δ som er slik at $\lim_{q\to 0} \omega_q = 0$.

OPPGITTE FORMLER OG KONSTANTER

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k},0}$$

$$\int d^3r\ e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\ F(r) = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty\ dr\ r\ \sin(q\ r)\ F(r)$$

Kommutator-relasjoner for boson operatorer

$$[a_{\lambda_1}, a^\dagger_{\lambda_2}] = \delta_{\lambda_1,\lambda_2}$$

hvor λ_i representerer et sett med kvantetall.

Elektronets masse og ladning

$$\begin{aligned} m_e &= 9.1\cdot 10^{-31}\mathrm{kg} \\ e &= 1.6\cdot 10^{-19}\mathrm{C} \end{aligned}$$

Plancks konstant

$$h = 6.62\cdot 10^{-34}\mathrm{Js}$$

Permittivitetskonstanten i vakuum

$$\varepsilon_0 = 8.85\cdot 10^{12}\mathrm{C}^2/\mathrm{Nm}^2$$

Lyshastigheten

$$c = 3.0\cdot 10^{8}\mathrm{m/s}$$

$$\begin{aligned} 1\mathrm{eV} &= 1.602\cdot 10^{-19}\mathrm{J} \\ 1\mathrm{MeV} &= 10^{6}\mathrm{eV} \end{aligned}$$

Dirac ligningen (beskriver $S = 1/2$ partikler) for en partikkel med ladning q i et elektromagnetisk felt

$$[E - q\phi]\,\psi = \left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) + \beta mc^2\right]\psi$$

Dirac matrisene

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}; \quad \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}; \quad \beta^2 = 1; \quad \alpha_i^2 = 1$$

Pauli matrisene $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_1 \ \hat{x} + \sigma_2 \ \hat{y} + \sigma_3 \ \hat{z}$

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Algebra for Pauli-matriser

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijl} \sigma_l,$$

der ε_{ijl} er den totalt anti-symmetriske tensoren.

Spinn-bane identitet

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 &= \boldsymbol{\pi}^2 - q \ \hbar \ \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} \\ \boldsymbol{\pi} &= \mathbf{p} - q\mathbf{A} \\ \boldsymbol{\Sigma} &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dreieimpuls operatoren er gitt ved

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Spinn-bane kobling er gitt ved

$$H_{\mathrm{SO}} \sim \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

Indre energi U til et boson system med Hamilton operator gitt ved

$$H = H_0 + \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q$$

er gitt ved

$$U = \sum_q \omega_q \ \langle a_q^\dagger a_q \rangle = \sum_q \frac{\omega_q}{e^{\beta \omega_q} - 1}$$

der $\beta = 1/k_B T$, k_B er Boltzmann's konstant, og T er temperatur. Den tilhørende varmekapasiteten er gitt ved

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$$