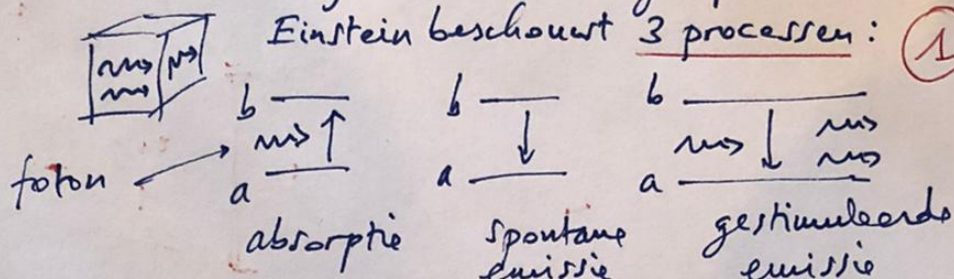


De redenering van Einstein heeft betrekking op elektromagnetische straling in evenwicht met een object (blackbody) op absolute temperatuur T .



$$\text{Absorpties/sec.} = \dot{N}_{ba} = B_{ba} \cdot N_a \cdot \rho(\omega_{ba}) \quad ; \quad \hbar\omega_{ba} = E_b - E_a \quad ①$$

($\dot{} = d/dt$) $\uparrow$ $\uparrow$ aantal atomen in niveau a
bekend uit dipolbenadering

en $\rho(\omega)$ is de spectrale energiedichtheid v/h EM veld $\left(\frac{E}{\text{Vol.} \cdot \nu}\right)$

We hebben $\dot{N}_{ba} = W_{ba} \cdot N_a$; W_{ba} = overgangstempo per atoom. $\uparrow$ frequentie

$$\text{Anderzijds: Emissies/sec.} = \dot{N}_{ab} = \underbrace{A_{ab} \cdot N_b}_{\text{spontaan!}} + B_{ab} \cdot N_b \cdot \rho(\omega_{ba}) \quad ①$$

Thermisch evenwicht bij temp $T \Leftrightarrow N_a = \text{const.}$; $N_b = \text{const.}$, $\frac{N_b}{N_a} = e^{-(E_b - E_a)/kT}$ ①

$$\Rightarrow \boxed{\dot{N}_{ba} = \dot{N}_{ab}} \quad ① \Rightarrow \frac{N_b}{N_a} = \frac{B_{ba} \rho(\omega_{ba})}{B_{ab} \rho(\omega_{ba}) + A_{ab}}$$

en dus $\rho(\omega_{ba}) = \frac{A_{ab}}{B_{ba} e^{\hbar\omega_{ba}/kT} - B_{ab}}$ wat consistent moet zijn met de wet v. Planck (1900) ①

Dus: $\begin{cases} B_{ba} = B_{ab} \end{cases}$, zoals we al wisten uit de dipolbenadering
en $\begin{cases} A_{ab} = \frac{\hbar \omega_{ba}^3}{\pi^2 c^3} \cdot B_{ab} \end{cases}$ ①/2

$$\Rightarrow W_{ab}^{(\text{spontaan})} \equiv A_{ab} = \frac{\omega_{ba}^3}{3\pi c^2 \hbar \epsilon_0} |\vec{D}_{ba}|^2 \quad ①$$

Dit is consistent met de klassieke concepten van Larmor (billerende ladingen stralen EM golven uit) maar de kwantumformule is kwantitatief. ①/2

Oefening: Variatierekening (6pt).

Harmonische oscillator $\langle x|H|\psi \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right) \psi(x)$

- Grondtoestandsenergie E_0 m.b.v. één-parameter familie van testfuncties $\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2}$
- Welke testfuncties voor 1st aangeslagen toestand?

Oplossing: ψ_α is niet genormeerd, dus

$$\begin{aligned}
 1pt \quad E_0 &\leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-\alpha x^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2\alpha x^2}} \\
 &= \underbrace{\frac{\hbar^2}{m} \frac{\int e^{-2\alpha x^2} dx}{\int e^{-2\alpha x^2} dx}}_1 - \underbrace{\frac{\hbar^2}{m} 2\alpha^2 \frac{\int x^2 e^{-2\alpha x^2} dx}{\int e^{-2\alpha x^2} dx}}_{\text{Var}(x)} + \underbrace{\frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\int x^2 e^{-2\alpha x^2} dx}{\int e^{-2\alpha x^2} dx}}_{\text{Var}(x)}
 \end{aligned}$$

$$\text{met } \text{Var}(x) \equiv \sigma^2 = \int x^2 e^{-x^2/2\sigma^2} dx / \int e^{-x^2/2\sigma^2} dx \text{ met } \sigma^2 \equiv \frac{1}{4\alpha}.$$

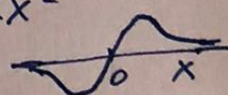
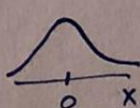
$$1pt \text{ Dus } E_0 \leq \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{4\alpha} = F(\alpha)$$

$$1pt \quad F(\alpha) \text{ is minimaal } \Leftrightarrow \frac{dF}{d\alpha} = 0 \text{ en } \frac{d^2 F}{d\alpha^2} > 0 \Leftrightarrow \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

$$1pt \quad \text{Dan is } F\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right) = \frac{\hbar\omega}{2} \text{ dit is de exacte } E_0!$$

Bovendien is voor deze waarde van α de functie $\psi_\alpha(x)$ een eigenfunctie van H want de termen met $\text{Var}(x)$ vallen tegen elkaar weg zodat $\langle x | H | \psi_{\frac{m\omega}{2\hbar}} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \psi_{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x)$.

Tenslotte is $\psi_\alpha(x)$ een even functie van x , geschikt voor de grondtoestand terwijl we een oneven functie nodig hebben voor de 1ste aangeslagen toestand, dus gebruiken we daarvoor $\psi_{1,\alpha}(x) = x e^{-\alpha x^2}$



Oplossing oefening Spin-baan koppeling (6pt).

$$l=1 \text{ en } s=1 \Rightarrow \mathcal{E}_H = \mathcal{E}_{l=1} \otimes \mathcal{E}_{s=1}, \text{ dimensie} = 9.$$

$$\text{Hamiltoniaan } W_{SB} = \alpha^2 E_I \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{\hbar^2}$$

$$\alpha \approx \frac{1}{137}, \quad E_I = 13,6 \text{ eV}$$

We moeten hier werken met de gekoppelde basis, die een eigenbasis is van de CSCO $\{L^2, S^2; J^2, J_z\}$ en dus tevens eigenbasis is van $\vec{L} \cdot \vec{S}$, want

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) \quad ; \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad 1pt$$

De onthoppelde eigenbasis van de CSCO $\{L^2, S^2; L_z, S_z\}$ is geen eigenbasis van $\vec{L} \cdot \vec{S}$ omdat o.a. L_x en L_y niet commuteren met L_z etc.

We noteren de gekoppelde basis met $\{|j, m_j\rangle\}$ en de onthoppelde met $\{|m\rangle \otimes |m_s\rangle\}$ in korte notatie; met $m = -1, 0, 1$ en $m_s = -1, 0, 1$.

Voor j hebben we $j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$ 1pt
dus $j = 2, 1, 0$ en $m_j = -j, -j+1, \dots, j$

$$\text{Hilbertruimte } \mathcal{E}_H = \mathcal{E}_{j=2} \oplus \mathcal{E}_{j=1} \oplus \mathcal{E}_{j=0}, \text{ dim} = 5+3+1=9.$$

$$\text{Energieniveaus: } E_{SB}(j) = \alpha^2 E_I \frac{1}{2} [j(j+1) - 2 - 2]$$

In eV geeft dit :

ontaarding

$$E_{SB}(2) = \alpha^2 E_I = 7,25 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

(5)

$$E_{SB}(1) = -\alpha^2 E_I$$

(3)

2 pt.

$$E_{SB}(0) = -2\alpha^2 E_I = -14,5 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

niet ontand
(grondtoestand)

Nu bepalen we de genormeerde eigentoestanden.

Deelruimte $j=2$.

$$|2,2\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle$$

We passen nu $J_- = L_- \otimes 1 + 1 \otimes S_-$ toe en we houden rekening met de formule (41 e.v.) uit het formulerium om de coëfficiënten te vinden en vervolgens normeren we.

$$L_- |m\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]^{1/2} \hbar |m-1\rangle \quad ; l=1$$

$$S_- |m_s\rangle = [s(s+1) - m_s(m_s-1)]^{1/2} \hbar |m_s-1\rangle \quad ; s=1$$

$$\text{Dit geeft } |2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle)$$

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} (\sqrt{2} |-1\rangle \otimes |1\rangle + 2\sqrt{2} |0\rangle \otimes |0\rangle + \sqrt{2} |1\rangle \otimes |-1\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} (|-1\rangle \otimes |1\rangle + 2|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle) \quad 1 \text{ pt}$$

en analoog uitbreiden voor $|2,-1\rangle$ en $|2,-2\rangle$.

Deelruimte $j=1$.

$$|1,1\rangle \perp |2,1\rangle, \text{ dus } |1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |0\rangle)$$

$$J_- \text{ toepassen levert } |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle \otimes |1\rangle - |1\rangle \otimes |-1\rangle)$$

en analoog $|1,-1\rangle$.

Deelruimte $j=0$. $|0,0\rangle \perp |2,0\rangle$ en $|1,0\rangle$ en $J_z |0,0\rangle = 0$

$$\text{Dit geeft } |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|-1\rangle \otimes |1\rangle - |0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle) \quad 1 \text{ pt}$$