

Fermi "Golden Rule" (8 pt).

Tijdsafhankelijke storingsrekening en Dirac's methode van de variatie van constanten.

$$H = H_0 + \lambda H'(t) ; H'(t) = 0 \text{ voor } t < 0.$$

Schrödingervergelijking:

$$i\hbar \dot{\psi} = H \psi \text{ met } \psi(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}$$

$$\text{met } C_k(0) \equiv C_k^{(0)} \text{ en } C_k^{(0)} = \delta_{ka} ; H_0 \psi_k^{(0)}(\vec{r}) = E_k \psi_k^{(0)}(\vec{r})$$

Invullen geeft

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} = \lambda \sum_k C_k(t) [H'(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r})] e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}$$

scalair vermenigvuldigen met $\psi_b^{(0)}(\vec{r})$ geeft ($\{\psi_k^{(0)}\}$ is een basis),

$$(1) \quad i\hbar \dot{C}_b(t) = \lambda \sum_k C_k(t) H'_{bk}(t) e^{-i(E_k^{(0)} - E_b^{(0)})t/\hbar} ; E_k^{(0)} - E_b^{(0)} \equiv \hbar \omega_{kb}$$

zodat, in eerste orde in λ , met de definitie $C_k(t) = C_k^{(0)} + \lambda C_k^{(1)}(t) + \dots$,

$$C_b^{(1)}(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' H'_{ba}(t') e^{i\omega_{ba}t'}, \text{ i.h.b. } C_a^{(1)} = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t dt' H'_{aa}(t')$$

(1) Voor een stapfunctiestoring wordt dit

$$C_b^{(1)}(t) = \frac{H'_{ba}}{\hbar \omega_{ba}} (1 - e^{-i\omega_{ba}t}), \text{ i.h.b. } C_a^{(1)} = \frac{H'_{aa} \cdot t}{i\hbar}$$

Hieruit volgt dat de overgangswaarschijnlijkheid in eerste orde storingsrekening van tweede orde is in λ ,

$$(1) \quad P_{b \leftarrow a} = \lambda^2 |C_b^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\lambda^2}{\hbar^2} |H'_{ba}|^2 \frac{1 - \cos \omega_{ba}t}{\omega_{ba}^2} = \frac{2\lambda^2}{\hbar^2} |H'_{ba}|^2 F(t, \omega_{ba})$$

De veralgemening van deze formule naar een groep van eindtoestanden is gegeven:

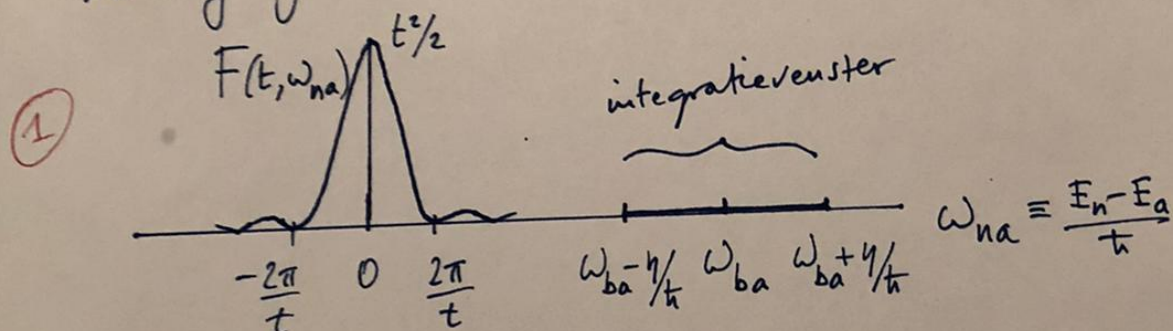
$$P_{b \leftarrow a}^{(v)}(t) = \frac{2\lambda^2}{\hbar^2} \int_{E_b^{(0)} - \eta}^{E_b^{(0)} + \eta} dE_n \rho(E_n) |H'_{na}|^2 F(t, \omega_{na})$$

Dit moet verder uitgewerkt worden om het overgangstempo te kunnen vinden.

① $\rho(E)$ is de toestandsdichtheid
voor η zeer klein is $H'_{na} \approx H'_{ba}$ en $\rho(E_n) \approx \rho(E_b^{(0)})$

zodat
$$P_{b \leftarrow a}^{(v)}(t) \approx \frac{2\lambda^2}{\hbar^2} \rho(E_b^{(0)}) |H'_{ba}|^2 \int_{E_b^{(0)} - \eta}^{E_b^{(0)} + \eta} dE_n F(t, \omega_{na})$$

Na lange tijd t vertoont de filterfunctie F een scherpe piek:



Opdat $P_{b \leftarrow a}^{(v)}$ verschillend van nul zou zijn moet het integratievenster goed overlappen met de piek van F .

We moeten dus hebben $|\omega_{ba}| < \frac{2\pi}{t}$, dus $E_b^{(0)} \approx E_a^{(0)}$

① d.i. behoud van energie, karakteristiek voor constante storing H' .

Als daarenboven het integratievenster breder is dan de piek van F , dan kunnen we de integraal over de ganze F nemen, wat $\hbar \pi t$ is.

① Dus, voor $\eta/\hbar > 2\pi/t$, $P_{b \leftarrow a}^{(v)}(t) \approx \frac{2\lambda^2}{\hbar} \rho(E_b^{(0)}) |H'_{ba}|^2 \pi t$, zodat

het overgangstempo gelijk is aan
$$W_{ba} = \frac{dP_{ba}^{(v)}}{dt} = \frac{2\lambda^2}{\hbar} \rho(E_b^{(0)}) |H'_{ba}|^2 \pi$$

①

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

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

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

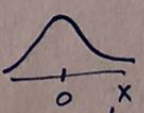
$$1pt \quad \text{Dus } E_0 \leq \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{4\alpha} = F(\alpha)$$

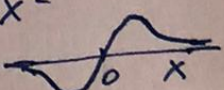
$$1pt \quad F(\alpha) \text{ is minimaal} \Leftrightarrow \frac{dF}{d\alpha} = 0 \text{ en } \frac{d^2 F}{d\alpha^2} > 0 \Leftrightarrow \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

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

Bovendien is voor deze waarde van α de functie $\psi_\alpha(x)$ een

1pt 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
 hebben voor  terwijl we een oneven functie nodig hebben voor de 1ste aangeslagen toestand,

1pt dus gebruiken we daarvoor $\psi_{1,\alpha}(x) = x e^{-\alpha x^2}$ 

Oplossing van de spin-spin koppeling (6 pt.)

$$W_{SS} = \varepsilon \frac{\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{\hbar^2} = \varepsilon \frac{\vec{J}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2}{2\hbar^2}; \quad \vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad 1pt$$

Een mogelijke CSCO is $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ met onthoppelde eigenbasis $\{|S_1, m_{S1}\rangle \otimes |S_2, m_{S2}\rangle\}$ in een Hilbertruimte $\mathcal{E}_{S_1} \otimes \mathcal{E}_{S_2}$ van dimensie $(2S_1+1)(2S_2+1) = 16$, met $S_1 = 3/2 = S_2$, maar dit is geen eigenbasis van $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, want S_x en S_y commuteren niet met S_z en verhogen of verlagen m_s met ± 1 .

Wanneer we werken met de CSCO $\{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{J}^2, J_z\}$ dan is de geassocieerde gekoppelde eigenbasis wel een eigenbasis van $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$. Deze basis is $\{|S_1, S_2; j, m_j\rangle\}$ of kortweg $\{|j, m_j\rangle\}$, met $j = |S_1 - S_2|, \dots, S_1 + S_2$ met stappen van 1, dus $j = 0, 1, 2, 3$. 1pt

De Hilbertruimte is de directe som $\mathcal{E}_{j=3} \oplus \mathcal{E}_{j=2} \oplus \mathcal{E}_{j=1} \oplus \mathcal{E}_{j=0}$ van dimensie $7 + 5 + 3 + 1 =$ opnieuw 16 .

Wiskundig gezien hebben we dan de mogelijke energieniveaus

$$\begin{aligned} E &= E_1 + E_2 + E_{SS} \quad \text{want } H = H_1 + H_2 + W_{SS} \\ &= -5 \text{ eV} - 5 \text{ eV} + E_{SS} \end{aligned}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{2 onafhankelijke deeltjes}}$

$$\begin{aligned} \text{met } E_{SS} &= \varepsilon_2 (j(j+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)) \\ &= \frac{1}{2} (j(j+1) - 15/2) \text{ eV} \end{aligned}$$

Fysisch gezien echter geldt het Pauli verbod en moet de totale golfunctie antisymmetrisch zijn voor verwisseling van de toestanden van fermion 1 en 2.

Omdat de plaatsfunctie symmetrisch is en blijft moet de spinfunctie antisymmetrisch zijn. 1pt

We construeren nu de gekoppelde basis mbv de Clebsch-Gordan methode.

Deelruimte $j=3$: $|3,3\rangle = |\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{3}{2}\rangle$

J_- toepassen geeft $|3,2\rangle \propto |\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{3}{2}\rangle + |\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle$

Het is duidelijk dat deze sequentie alleen symmetrische spinfuncties oplevert, dus we stoppen met $j=3$ en gaan naar $j=2$.

Deelruimte $j=2$: $|2,2\rangle \perp |3,2\rangle$ en $J_-|2,2\rangle = 2\hbar|2,1\rangle$

Dus $|2,2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{3}{2}\rangle - |\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle)$

waarbij we ook meteen correct normeren. Deze is OK want antisymmetrisch. We gaan verder

J_- toepassen geeft $|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{3}{2}\rangle - |\frac{3}{2}\rangle \otimes |-\frac{1}{2}\rangle)$

Nogmaals J_- toepassen is iets moeilijker omdat er ongelijke coëfficiënten optreden. We moeten de formule (41) e.v. uit het formularium gebruiken; in de gedaante

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

met $S_- = S_{1-}$ of S_{2-} ($S_{1-} \otimes 1 + 1 \otimes S_{2-} \equiv J_-$)

Dit geeft $|2,0\rangle = \frac{1}{2} [|-\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{3}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle$

correct genormeerd

$$- | \frac{1}{2} \rangle \otimes | - \frac{1}{2} \rangle - | \frac{3}{2} \rangle \otimes | - \frac{3}{2} \rangle]$$

Analoog vinden we $|2,-1\rangle$ en $|2,-2\rangle$, allemaal antisymmetrisch. 1pt

Perk verder op dat $|1,1\rangle \propto |-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{3}{2}\rangle - \frac{2}{\sqrt{3}} |\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle + |\frac{3}{2}\rangle \otimes |-\frac{1}{2}\rangle$,

die $\perp$ staat op $|3,1\rangle$ en $|2,1\rangle$, opnieuw symmetrisch is.

Dus moeten we alleen nog $|0,0\rangle$ zoeken.

Na een berekening volgt dat

$$|0,0\rangle = \frac{1}{2} \left(\left| -\frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right)$$

inderdaad antisymmetrisch is. Er zijn dus maar 6 van de 16 toestanden fysisch in orde: $\{|2, m_2\rangle, |0,0\rangle\}$

$$\text{met } m_2 = 2, 1, 0, -1, -2$$

De fysisch toegelaten energiewaarden zijn dan

$$E_{j=2} = \frac{6 - 15/2}{2} \text{ eV} - 10 \text{ eV} = -10,75 \text{ eV}$$

$$\text{outaarding} = (5)$$

1pt

$$E_{j=0} = -15/4 \text{ eV} - 10 \text{ eV} = -13,75 \text{ eV}$$

niet outaard

(grondtoestand) 1pt

door gebruik te maken van

$$E_j = 2E_0 + \frac{1}{2} (j(j+1) - 15/2) \text{ eV}$$