LAMBFORSKYDNING I EN ELEKTRISK LEDENDE MESOSKOPISK RING



Institut for Fysik og Nanoteknologi
 \bullet Skjernvej 4A \bullet DK-9220 A
alborg Ø



Aalborg Universitet Institut for Fysik og Nanoteknologi Skjernvej 4A, 9220 Aalborg Ø Telefon +45 99 40 92 15 http://www.physics.aau.dk

Titel:

Lambforskydning i en elektrisk ledende mesoskopisk ring

Semester:

FYS5

Projektperiode:

1. sep. 2009 - 10. jun. 2010

Lavet af:

Dann Skou Olesen

Vejleder:

Prof. Ole Keller

Oplagstal: 5

Sidetal: 59

Appendiks startside: 55

Synopsis:

Formålet med denne rapport er at give en introduktion til Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Med udgangspunkt i teorien for den urelativistiske Lambforskydning i et hydrogenatom fundet af H. A. Bethe, opstilles et urelativistisk udtryk for Lambforskydningen i en ring. Undervejs findes bl.a resultatet for hydrogenatomet, hvor Lambforskydningen for $2s_{1/2}$ -tilstanden beregnes til ca. 1040*MHz*.

Der findes frem til et generelt udtryk for Lambforskydningen i en ring, som er afhængig af ringens ledningselektrontæthed og Fermi-Diracfordelingen. Ringens stationære elektrontilstande indgår også i teorien for Lambforskydningen, og disse er beregnet ved fri-elektron-modellen med uendelig barrierer. Lambforskydningen vises at være relateret til Fermienergien for temperaturer omkring 0K. For et specialtilfælde, hvor ringens radius er større end bredden, vises det, at Lambforskydningen er omvendt proportional ringens rumfang.

For en bestemt elektronovergang laves der numeriske beregninger for Lambforskydningen i ringe af aluminium (Al) og galliumarsenid (GaAs), hvor Lambforskydningen illustreres som funktion af ringens temperatur, radius og bredde. For temperaturer omkring 0K ses tydelige spring i Lambforskydningen, som et resultat af at ringen gøres større og dermed indeholder flere ledningselektroner. Som temperaturen stiger til 300K, ses disse spring at forsvinde gradvist. I udvalgte GaAs-ringe ses størrelsen af Lambforskydningen at forsvinde, idet temperaturen stiger til 100K. Størrelsen af Lambforskydningen i bestemte Al-ringe beregnes til at ligge omkring $10^7 - 10^9 Hz$, hvorimod størrelsen af Lambforskydningen for GaAs-ringe kun når op på ca. 110Hz.

ABSTRACT

When an atom emits light there occurs a back-action on the particle. Part of the reaction, called the Lamb shift, changes the relative separation of the energy levels. The Lamb shift was first observed by Lamb and coworkers; see [Lamb og Retherford, 1947], and references herein. Shortly after, a nonrelativistic QED-calculation by Bethe in [Bethe, 1947] led to good agreement with the observations. In the following years refined relativistic calculations [Kroll og Willis E. Lamb, 1949] resulted in an improved agreement between theory and experiment.

In this report, we present a nonrelativistic calculation of the Lamb shift in conducting (Al, GaAs) circular rings. By varying the ring dimensions one can modify the size of the Lamb shift. To determine the Lamb shift it is of central importance to know the free-electron density distribution in the stationary states. Here, we use the free-electron infinite-barrier model, and minor modifications of this, to obtain qualitative results for the Lamb shift at different temperatures.

Numerical calculations of the Lamb shift between radial quantum states are presented as functions of the ring temperature, radius, and thickness. As a major general result we find that the spectra exhibit pronounced quantum-size effects. Such effects have also been observed for the angular momentum photon drag phenomenon in mesoscopic rings [Keller, 1997]. The size of the Lamb shift is found to be inverse proportional to volume of the ring.

Finally, a perspective has been made in order to highlight topics which have the possibility to improve the theory of the Lamb shift. A small discussion will bring up topics such as, the spin of the electron, the potential energy in the ring, and a relativistic correct theory for the Lamb shift in conducting rings.

FORORD

Denne rapport er resultatet af et specialeprojekt ved Institut for Fysik og Nanoteknologi på Aalborg Universitet. Rapporten er udarbejdet med henblik på at give læseren en begyndende forståelse for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Rapporten forudsætter kendskab til grundlæggende kvantemekanik, statistisk mekanik og relativitets teori.

I rapporten benyttes to slags henvisninger. Når et henvisningsnummer er i parentes, som f.eks. (1.2) henvises der til en ligning, ulighed eller linje med dette nummer, mens henvisningen 'Afsnit 1.2' henviser til et helt afsnit med dette nummer. Sidstnævnte henvisning findes ligeledes til kapitler.

Litteraturhenvisninger anføres som regel i starten af afsnit og kapitler og noteres [Forfatter(e), udgivelsesår, evt. placering i kilden]. Litteraturhenvisningerne henviser til litteraturlisten, som findes bagerst i rapporten.

Der gives en speciel tak til specialevejleder Prof. Ole Keller fra Institut for Fysik og Nanoteknologi ved Aalborg Universitet for en mangfoldig og motiverende vejledning.

Aalborg den 10. juni 2010

Dann Skou Olesen

INDHOLD

1	Urelativistisk teori for Lambforskydningen								
	1.1	Selvenergi for en urelativistisk elektron							
	1.2	Elektronens elektromagnetiske masse	19						
	1.3	Lambforskydningen i hydrogenatomet	20						
2	Lambforskydningen i en elektrisk ledende ring								
	2.1	1 Fri-elektron-model for en ring							
	2.2	Selvenergien for en elektron i en ring $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	26						
	2.3	Specialtilfælde	28						
3	Numeriske resultater								
	3.1	Beregning af Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring	31						
	3.2	Lambforskydningen i en Al-ring	33						
	3.3	Lambforskydningen i en GaAs-ring	41						
4	Perspektivering								
	4.1	Lambforskydningen for en ring i et eksternt magnetfelt \ldots \ldots \ldots \ldots	49						
	4.2	Den potentielle energi	49						
	4.3	Relativistisk Lambforskydning	50						
5	Kor	klusion	53						
A	Perturbationsteori								
	A.1	Stationær perturbationsteori	55						
	A.2	Bestemmelse af energien til anden orden i λ	56						
$\mathbf{Li}^{\mathbf{r}}$	ttera	tur	59						

INDLEDNING

Energiniveauerne for en elektron i det simplest atom, hydrogenatomet, har vist sig ved observationer udført af Lamb og hans medarbejdere ikke at stemme overens med forudsigelserne for samtidens kvantemekaniske ligning, Diracligningen. Dette fremgår af [Lamb og Retherford, 1947], hvor Lamb og hans medarbejdere via deres observationer har resoneret sig frem til, at der er en opsplitning af energiniveauerne for tilstandene $2s_{1/2}$ og $2p_{1/2}$, som Diracligningen ellers forudsiger, at er sammenfaldende. Opsplitningen er af Lamb og hans medarbejdere blevet fundet til at være omkring 1000*MHz*. Denne effekt er siden blevet kendt som Lambforskydningen.

Kort tid efter observationen af Lambforskydningen finder Bethe et urelativistisk resultat, som godtgører størrelsen af Lambforskydningen. I [Bethe, 1947] ses en urelativistisk beregning, hvor Bethe gør brug af en afskæringsfrekvens, hvorved Lambforskydningen ikke divergerer. Bethe finder frem til, at Lambforskydningen i hydrogenatomet er en effekt, som stort set ikke påvirker p-tilstandene. Der fremkommer således en opsplitning af $2s_{1/2}$ - og $2p_{1/2}$ -tilstanden; se også figur 1.



Figur 1: Figuren viser et energidiagram for udvalgte energiniveauer i hydrogenatomet. Til venstre ses energiniveauerne forudsagt af Diracligningen, og til højre ses de aktuelle energiniveauer, hvor der er taget højde for den relativistiske Lambforskydning. Forskellen mellem niveauerne er alle målt i MHz.

I Bethes model for Lambforskydningen indgår antallet af positive ladninger i atomkernen som en parameter, og dermed er det en model for hydrogenlignende atomer. Det vil sige atomer, hvor kun en elektrontilstand er besat. Interessant ville det så være at betragte et system med flere elektroner, for at se hvordan elektronerne påvirker Lambforskydningen. Derudover ville det også være interessant, hvis systemets rummelige dimensioner kunne varieres, for derefter at se Lambforskydningens forbindelse hertil. Betragt derfor en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Antallet af elektroner i ringen vil således afhænge af det materiale, som ringen er fremstillet af samt ringens rumlige dimensioner. Det er således tilnærmelsesvis muligt at lokalisere ringens elektroner i forhold til f.eks. en sfære. Så længe ringen er tilstrækkelig tynd vil en elektrons bevægelse rundt i ringen kunne beskrives ved kun én koordinat. Lambforskydningens afhængighed af de rumlige dimensioner kan derfor simplificeres, idet der vælges en mesoskopisk ring.

I kapitel 1 findes der frem til et generelt udtryk for en elektrons selvenergi, som giver anledning til en forskydning af energiniveauerne for en elektron, som befinder sig i et elektromagnetisk potential også kendt som Lambforskydningen. Bethes urelativistiske udregning af lambforskydningen fra [Bethe, 1947] vil bl.a. blive gennemgået i dette kapitel. Det elektromagnetiske bidrag til elektronens masse vil også kort blive beskrevet. Til sidst i kapitlet beregnes Lambforskydningen for en elektron i $2s_{1/2}$ -tilstanden i hydrogenatomet.

I kapitel 2 anvendes formalismen fra kapitel 1 til at beskrive Lambforskydningen for en mesoskopisk elektrisk ledende ring. Først findes de mulige elektrontilstande for ringen, da det er blevet vist, at disse indgår i Bethes urelativistiske beregning af Lambforskydningen. Et tilnærmet udtryk for Lambforskydningen i en aluminium ring vil blive opstillet og sammenlignet med det generelle udtryk. I det tilfælde, hvor der er mange elektroner i ringen, vil det så være det tilnærmede udtryk, som anvendes til at finde Lambforskydningen som funktion af ringens dimensioner eller temperatur.

I kapitel 3 præsenteres alle de numeriske resultater, som er fundet ved brug af teorien for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Lambforskydningen beregnes både for ringe af aluminium og galliumarsenid. Herunder vil størrelsen af Lambforskydningen blive beregnet som funktion af ringens brede, inder radius og temperatur. Ringen anses for at være fladtrykt i alle disse beregninger, hvorved Lambforskydningen som funktion af ringens "højde" ikke vil blive betragtet nærmere.

I kapitel 4 gives en perspektivering i forhold til den urelativistiske teori for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Perspektiveringen gives med henblik på at kunne forbedre teorien for Lambforskydningen. Herunder vil elektronens spin og ringens potentielle energi kort blive omtalt. Desuden vil også en relativistisk teori for Lambforskydningen blive nævnt, som et forslag til en forbedring.

URELATIVISTISK TEORI FOR LAMBFORSKYDNINGEN

I dette kapitel findes der frem til et generelt udtryk for en elektrons selvenergi, som giver anledning til en forskydning af energiniveauerne for en elektron også kendt som Lambforskydningen. Bethes udregning af lambforskydningen fra [Bethe, 1947] vil bl.a. blive gennemgået i dette kapitel. Som et specialtilfælde vil der til sidst blive lagt vægt på Lambforskydningen for hydrogenatomet, hvor Lambforskydningen giver en opsplitning af tilstandene $2s_{1/2}$ og $2p_{1/2}$. Kapitlet er skrevet på baggrund af [Bethe, 1947], [Cohen-Tannoudji et al., 1989] og [Cohen-Tannoudji et al., 1992, s. 109-117, 537-548].

1.1 Selvenergi for en urelativistisk elektron

Et bidrag til en elektrons selvenergi opstår, idet den udsender en virtuel foton for derefter at optage den igen. For denne proces er der to muligheder:

- (α) Den første mulighed er, hvis elektronen udsender en foton, som øjeblikkeligt absorberes igen, hvorved elektronen forbliver i den samme tilstand.
- (β) Den anden mulighed er, hvis elektronen udsender en foton, hvorved elektronen overgår til en ny tilstand for derefter at absorbere fotonen igen, således at elektronen venter tilbage til den oprindelige tilstand.

De to muligheder ses også illustreret på figur 1.1.

Det antages, at størrelsen af bølgetalsvektorerne, $|\vec{q}|$, for de udsendte virtuelle fotoner maksimalt er $Q_C = \frac{m_0 c}{\hbar}$, hvilket svarer til Comptonbølgetallet for elektronen. Denne afgrænsning laves, da der, så vidt det er muligt, ses bort fra relativistiske effekter. Desuden antages det, at elektronen er en spinløs partikel med masse m_0 og ladning -e.

Hamiltonoperatoren for en elektron med den potentielle energi, V_0 , og som vekselvirker med et elektromagnetisk felt, kan skrives

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{I1} + \hat{H}_{I2},$$

 hvor

$$\hat{H}_{0} = \frac{\hat{p}^{2}}{2m_{0}} + V_{0}(\vec{r})$$
$$\hat{H}_{I1} = \frac{e}{m_{0}}\vec{A}(\vec{r}) \cdot \hat{\vec{p}}$$
$$\hat{H}_{I2} = \frac{e^{2}}{2m_{0}}\vec{A}^{2}(\vec{r}).$$

Her er $\vec{A}(\vec{r})$ det elektromagnetiske vektorpotentiale, og $\hat{\vec{p}}$ er impulsoperatoren. Idet energiniveauerne og tilstandene for \hat{H}_0 antages at være kendte, kan energiniveauerne hørende til \hat{H} findes ved at anvende perturbationsteori. Ændringen i det n'te energiniveau regnet til anden ordens perturbation er jf. appendiks (A.18) givet ved

$$\delta E_n = \delta E_\alpha + \delta E_\beta,$$



Figur 1.1: På figur (α) ses det, hvorledes en elektron i udsender og absorberer en foton, hvorved elektronen forbliver i tilstand b. På figur (β) starter elektronen i tilstand b, hvor den efter udsendelsen af en foton og går over i tilstand a. Ved absorbtion af fotonen kommer elektronen så tilbage i tilstand b.

hvor

$$\delta E_n = E_n(\lambda) - E_n$$

$$\delta E_\alpha = \langle \phi_n | \hat{W}_0 | \phi_n \rangle$$
(1.1)

$$\delta E_{\beta} = \sum_{p \neq n} \frac{\left| \langle \phi_p | \hat{W}_0 | \phi_n \rangle \right|^2}{E_n - E_p}.$$
(1.2)

Den perturberede Hamiltonoperator er således givet ved

$$\hat{W}_0 = \hat{H}_{I1} + \hat{H}_{I2},$$

Det antages, at størrelsen af vektorpotentialet er tilstrækkelig lille, hvorved der kun medtages de led, som højest er regnet til anden orden i \vec{A} . Herved sættes led af større orden lig nul, hvorved

$$\sum_{p \neq n} \frac{\left| \langle \phi_p | \hat{H}_{I2} | \phi_n \rangle \right|^2}{E_n - E_p} = 0.$$

Det kan desuden vises, at

$$\langle \phi_n | H_{I1} | \phi_n \rangle = 0.$$

Ifølge (1.1) og (1.2) gælder der derfor, at

$$\delta E_{\alpha} = \langle \phi_n | \hat{H}_{I2} | \phi_n \rangle \tag{1.3}$$

$$\delta E_{\beta} = \sum_{p \neq n} \frac{\left| \langle \phi_p | H_{I1} | \phi_n \rangle \right|}{E_n - E_p}.$$
(1.4)

Det bemærkes her, at $|\phi_j\rangle$ er en samlet tilstand for elektronen og den virtuelle foton, som elektronen udsender og absorberer. Det ses, at (1.3) svarer til processen, (α), og at (1.4) svarer til processen, (β), som begge ses på figur 1.1. Betragt nu (1.4). Her skal der summeres over alle de mulige tilstande, som elektronen og den udsendte foton kan befinde sig i, hvorved der fås, at

$$\delta E_{\beta} = \sum_{n \neq m} \frac{\left| \langle \phi_m | \hat{H}_{I1} | \phi_n \rangle \right|^2}{E_m - E_n}$$

$$= \sum_{a \neq b} \sum_{\vec{q}, \varepsilon} \frac{\left| \langle b; 0 | \hat{H}_{I1} | a; \vec{q} \varepsilon \rangle \right|^2}{E_b - E_a - \hbar \omega}.$$
(1.5)

Det antages her, at de samlede tilstande kan skrives

$$|a; \vec{q}\varepsilon\rangle = |a\rangle |\vec{q}\varepsilon\rangle \tag{1.6}$$

$$|b;0\rangle = |b\rangle|0\rangle. \tag{1.7}$$

 $|a\rangle$ og $|b\rangle$ er elektrontilstandene. $|0\rangle$ og $|\vec{q}\varepsilon\rangle$ er fotontilstandene med henholdsvis ingen og én foton. Fotonen i tilstand $|\vec{q}\varepsilon\rangle$ er desuden karakteriseret ved en bølgetalsvektor, \vec{q} , og en polarisation, ε .

Da de udsendte fotoner kan have tilknyttet en kontinuert fordeling af bølgetalsvektorer, \vec{q} , vil summen over \vec{q} i (1.5) skulle erstattes af et integral. Hvis fotonerne befandt sig i en boks med længde, bredde og højde lig L, ville summen gå over i et integral som

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\vec{q}} \sim \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3}.$$
(1.8)

Perturbationen i (1.5) er givet ved $\hat{H}_{I1} = \frac{e}{m_0} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r})$. Lad nu $\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}_{\perp}(\vec{r}) + \vec{A}_{\parallel}(\vec{r})$, hvor der i en Coulomb gauge jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 16 udtryk (B. 25. b)] gælder, at $\vec{A}_{\parallel}(\vec{r}) = \vec{0}$. Det klassiske vektorpotentialet $\vec{A}(\vec{r})$ for en planbølge kan således jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 29 udtryk (C. 27)] skrives som

$$\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}_{\perp}(\vec{r}) = A_{\omega} \left[\vec{\varepsilon} \alpha_{\varepsilon}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + \vec{\varepsilon} \alpha_{\varepsilon}^{*}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right].$$

hvor $A_{\omega} = \left[\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega L^3}\right]^{\frac{1}{2}}$ er en normeringskonstant, og hvor $\alpha_{\varepsilon}(\vec{q})$ og $\alpha_{\varepsilon}^*(\vec{q})$ er amplituderne for de forskellige modes, som er givet ved en polarisationsretning $\varepsilon = \varepsilon_1, \varepsilon_2$ og en bølgetalsvektor \vec{q} . Idet det elektromagnetiske felt kvantiseres, oversættes vektorpotentialet til en operator, og $\alpha_{\varepsilon}(\vec{q})$ og $\alpha_{\varepsilon}^*(\vec{q})$ oversættes til henholdsvis annihilations og skabelses operatoren, $\hat{a}_{\varepsilon}(\vec{q})$ og $\hat{a}_{\varepsilon}^+(\vec{q})$ jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 33]. Operatoren for vektorpotentialet bliver derfor

$$\hat{\vec{A}}(\vec{r}) = A_{\omega} \left[\vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + \vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}^{+}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right].$$
(1.9)

Indsættes (1.6), (1.7) og (1.9) i (1.5), hvorefter (1.8) anvendes, fås der, at

$$\delta E_{\beta} = \frac{e^2}{m_0^2} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \sum_{a,\varepsilon} \int \frac{\left| \langle 0 | \vec{A}(\vec{r}) | \vec{q}\varepsilon \rangle \cdot \vec{p}_{ba} \right|^2}{E_b - E_a - \hbar\omega} \, \mathrm{d}^3 q. \tag{1.10}$$

hvor $\vec{p}_{ba} = \langle b | \hat{\vec{p}} | a \rangle$.

Ved brug af (1.9) betragtes nu

$$\begin{split} \langle 0 | \hat{\vec{A}}(\vec{r}) | \vec{q}\varepsilon \rangle &= \langle 0 | A_{\omega} \left[\vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + \vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}^{+}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right] | \vec{q}\varepsilon \rangle \\ &= A_{\omega} \left[\langle 0 | \vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \vec{q}\varepsilon \rangle + \langle 0 | \vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}^{+}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \vec{q}\varepsilon \rangle \right] \end{split}$$

Da $\hat{a}_{\varepsilon}^{+}(\vec{q})|\vec{q}\varepsilon\rangle = \sqrt{2}|2\vec{q}\varepsilon\rangle$ jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 186], og da fotontilstandene er ortonormeret, hvorved $\langle 0|2\vec{q}\varepsilon\rangle = 0$, fås der, at

$$\begin{aligned} \langle 0 | \vec{A}(\vec{r}) | \vec{q} \varepsilon \rangle &= A_{\omega} \langle 0 | \vec{\varepsilon} \hat{a}_{\varepsilon}(\vec{q}) e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} | \vec{q} \varepsilon \rangle \\ &= A_{\omega} \langle 0 | \vec{\varepsilon} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} | 0 \rangle \\ &= A_{\omega} \vec{\varepsilon} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} \langle 0 | 0 \rangle \\ &= A_{\omega} \vec{\varepsilon} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}. \end{aligned}$$
(1.11)

Indsættes (1.11) i (1.10), haves der, at

$$\delta E_{\beta} = \frac{e^2}{m_0^2} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \sum_{a,\varepsilon} \int \frac{\left|A_{\omega}\vec{\varepsilon}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\cdot\vec{p}_{ba}\right|^2}{E_b - E_a - \hbar\omega} d^3q \qquad (1.12)$$
$$= \frac{e^2}{m_0^2} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \sum_{a,\varepsilon} \int A_{\omega}^2 \frac{\left|\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_{ba}\right|^2}{E_b - E_a - \hbar\omega} d^3q$$
$$= \frac{e^2}{m_0^2} \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c(2\pi)^3} \sum_{a,\varepsilon} \int \frac{1}{q} \frac{\left(\vec{p}_{ba}\cdot\vec{\varepsilon}\right)^*\left(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}_{ba}\right)}{E_b - E_a - \hbar cq} d^3q$$
$$= \frac{e^2}{m_0^2} \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 c(2\pi)^3} \sum_a \int \frac{1}{q} \frac{\vec{p}_{ba}^* \cdot \left(\sum_{\varepsilon}\vec{\varepsilon}\vec{\varepsilon}\right)\cdot\vec{p}_{ba}}{E_b - E_a - \hbar cq} d^3q,$$

idet en fri foton har dispersions
relation $\omega=cq.$ Ifølge [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 36 formel (1)] er

$$\sum_{\varepsilon} \vec{\varepsilon} \vec{\varepsilon} = 1 - \vec{\kappa} \vec{\kappa},$$

hvor

$$\vec{\kappa} = \left(\begin{array}{c} \cos\phi\sin\theta\\ \sin\phi\sin\theta\\ \cos\theta \end{array}\right)$$

Her af fås udtrykket i (1.13) til

$$\delta E_{\beta} = \frac{e^{2}\hbar}{2\varepsilon_{0}c(2\pi)^{3}m_{0}^{2}} \sum_{a} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{Q_{C}} \frac{1}{q} \frac{\vec{p}_{ba}^{*} \cdot (\mathbb{1} - \vec{\kappa}\vec{\kappa}) \cdot \vec{p}_{ba}}{E_{b} - E_{a} - \hbar cq} q^{2} \sin\theta \, \mathrm{d}q \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \qquad (1.13)$$
$$= \frac{e^{2}\hbar}{2\varepsilon_{0}c(2\pi)^{3}m_{0}^{2}} \sum_{a} \vec{p}_{ba}^{*} \cdot \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} (\mathbb{1} - \vec{\kappa}\vec{\kappa}) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \cdot \vec{p}_{ba} \int_{0}^{Q_{C}} \frac{q}{E_{b} - E_{a} - \hbar cq} \, \mathrm{d}q.$$

I integrationen over q ses der bort fra fotoner med bølgetal, som er over afskæringen, Q_C . Denne afskæring indføres for at lave integralet konvergent. Da denne model for Lambforskydningen er urelativistisk, giver afskæringen også mulighed for af afholde relativistiske effekter vedrørende elektronens selvenergi.

Der gælder, at

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} (\mathbb{1} - \vec{\kappa}\vec{\kappa}) \sin\theta \, d\theta \, d\phi \qquad (1.14)$$

$$= \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \begin{pmatrix} 1 - \cos^{2}\phi \sin^{2}\theta & \cos\phi \sin\phi \sin^{2}\theta & \cos\phi \sin\theta \cos\theta \\ \cos\phi \sin\phi \sin^{2}\theta & 1 - \sin^{2}\phi \sin^{2}\theta & \sin\phi \sin\theta \cos\theta \\ \cos\phi \sin\theta \cos\theta & \sin\phi \sin\theta \cos\theta & 1 - \cos^{2}\theta \end{pmatrix} \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$= \int_{0}^{\pi} \begin{pmatrix} 2\pi - \pi \sin^{2}\theta & 0 & 0 \\ 0 & 2\pi - \pi \sin^{2}\theta & 0 \\ 0 & 0 & 2\pi - 2\pi \cos^{2}\theta \end{pmatrix} \sin\theta \, d\theta$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{8\pi}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{8\pi}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{8\pi}{3} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{8\pi}{3} \mathbb{1}$$

Da energien af en fri foton er $E = \hbar cq$, fås der ved indsættelse af (1.14) i (1.13), at

$$\delta E_{\beta} = \frac{e^{2}\hbar}{2\varepsilon_{0}c(2\pi)^{3}m_{0}^{2}} \sum_{a} \vec{p}_{ba}^{*} \cdot \frac{8\pi}{3} \mathbb{1} \cdot \vec{p}_{ba} \int_{0}^{Q_{C}} \frac{q}{E_{b} - E_{a} - \hbar cq} \, \mathrm{d}q \qquad (1.15)$$
$$= \frac{e^{2}\hbar}{6\varepsilon_{0}c\pi^{2}m_{0}^{2}} \sum_{a} |\vec{p}_{ba}|^{2} \int_{0}^{Q_{C}} \frac{q}{E_{b} - E_{a} - \hbar cq} \, \mathrm{d}q$$
$$= \frac{e^{2}}{6\varepsilon_{0}\hbar c^{3}\pi^{2}m_{0}^{2}} \sum_{a} |\vec{p}_{ba}|^{2} \int_{0}^{E_{0}} \frac{E}{E_{b} - E_{a} - E} \, \mathrm{d}E,$$

hvor $E_0 = \hbar c Q_C$. Dette udtryk for selvenergien gælder for en fri elektron såvel som en bundet elektron.

Da bølgefunktionen for en fri elektron er givet ved planbølger, gælder der, at

$$\vec{p}_{ba} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k}_b \cdot \vec{r}} \frac{\hbar}{i} \nabla e^{i\vec{k}_a \cdot \vec{r}} d^3 r$$
$$= \frac{\hbar \vec{k}_a}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k}_a - \vec{k}_b) \cdot \vec{r}} d^3 r$$
$$= \hbar \vec{k}_a \delta(\vec{k}_a - \vec{k}_b).$$

For en fri elektron fås (1.15) til

$$\delta E_{\beta,0} = \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \sum_a |\hbar \vec{k}_a \delta(\vec{k}_a - \vec{k}_b)|^2 \int_0^{E_0} \frac{E}{E_b - E_a - E} \, \mathrm{d}E \qquad (1.16)$$
$$= -\frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \vec{p}_b^2 \int_0^{E_0} \, \mathrm{d}E,$$

hvor $\vec{p_b}$ er den frie elektrons middelimpuls. Ifølge (1.16) gælder der for den frie elektron, at

$$\sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 = \vec{p}_b^2.$$

Energibidraget i (1.15) for en elektron opstår, idet den elektromagnetiske masse af elektronen skal lægges til dens originale masse. Som det vil blive beskrevet i afsnit 1.2, er det derfor forskellen mellem selvenergien af den frie og den bundne elektron, der er af interesse. Betragt derfor

$$\delta E'_{\beta} = \delta E_{\beta} - \delta E_{\beta,0}$$
(1.17)
$$= \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 \int_0^{E_0} \frac{E}{E_b - E_a - E} \, \mathrm{d}E + \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \vec{p}^2 \int_0^{E_0} \, \mathrm{d}E$$
$$= \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 \int_0^{E_0} \frac{E}{E_b - E_a - E} + 1 \, \mathrm{d}E$$
$$= \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 \int_0^{E_0} \frac{E_b - E_a}{E_b - E_a - E} \, \mathrm{d}E$$

Lad afskæringen være bestemt ved $Q_C = \frac{m_0 c}{\hbar}$. Energien er så jf. de Broglie relationen i [Eisberg og Resnick, 1985, s. 56] og dispersionsrelationen for en foton bestemt ved $E_0 = \hbar c Q_C = m_0 c^2$. Der fås herved, at

$$\delta E'_{\beta} = \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2}$$

$$\times \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 \left(E_a - E_b \right) \left(\ln |E_b - E_a - m_0 c^2| - \ln |E_b - E_a| \right)$$
(1.18)

Da det antages, at $m_0c^2 \gg E_b - E_a$, giver (1.18), at

$$\delta E_{\beta}' = \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 \left(E_a - E_b\right) \ln \frac{m_0 c^2}{|E_b - E_a|}.$$
(1.19)

Lad

$$\ln \frac{m_0 c^2}{|\langle E_b - E_a \rangle|} = \frac{\sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 (E_a - E_b) \ln \frac{m_0 c^2}{|E_b - E_a|}}{\sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 (E_a - E_b)}.$$
(1.20)

hvor $\langle E_b - E_a \rangle$ jf. [Bethe, 1947, s. 340-341] er middel excitationsenergien. Summen over tilstandene, a, i (1.19) kan bestemmes ved at anvende identiteten

$$\mathbb{1} = \sum_{a} |a\rangle \langle a|.$$

Laves jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1992, s. 544] følgende betragtning, ses det, at

$$\langle b | [\hat{\vec{p}}, [\hat{\vec{p}}, \hat{H}_0]] | b \rangle$$

$$= \langle b | \hat{\vec{p}} \left(\sum_a |a\rangle \langle a| \right) [\hat{\vec{p}}, \hat{H}_0] | b \rangle - \langle b | [\hat{\vec{p}}, \hat{H}_0] \left(\sum_a |a\rangle \langle a| \right) \hat{\vec{p}} | b \rangle$$

$$= \sum_a \left\{ \vec{p}_{ba} \langle a | [\hat{\vec{p}}, \hat{H}_0] | b \rangle - \langle b | [\hat{\vec{p}}, \hat{H}_0] | a \rangle \vec{p}_{ab} \right\}$$

$$= \sum_a \left\{ \vec{p}_{ba} (\vec{p}_{ab} E_b - E_a \vec{p}_{ab}) - (\vec{p}_{ba} E_a - E_b \vec{p}_{ba}) \vec{p}_{ab} \right\}$$

$$= -2 \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 (E_a - E_b) .$$

$$(1.21)$$

Der gælder desuden, at

$$\begin{split} [\hat{\vec{p}}, [\hat{\vec{p}}, \hat{H}_0]] &= [\hat{\vec{p}}, [\hat{\vec{p}}, \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} + V_0]] \\ &= [\hat{\vec{p}}, [\hat{\vec{p}}, V_0]] \\ &= \hat{\vec{p}}[\hat{\vec{p}}, V_0] - [\hat{\vec{p}}, V_0]\hat{\vec{p}} \\ &= \hat{\vec{p}}\hat{\vec{p}}V_0 - 2\hat{\vec{p}}V_0\hat{\vec{p}} + V_0\hat{\vec{p}}\hat{\vec{p}} \\ &= \left(\hat{\vec{p}}^2V_0\right) + 2\left(\hat{\vec{p}}V_0\right)\hat{\vec{p}} + V_0\hat{\vec{p}}^2 - 2\left(\left(\hat{\vec{p}}V_0\right)\hat{\vec{p}} + V_0\hat{\vec{p}}^2\right) + V_0\hat{\vec{p}}^2 \\ &= -\hbar^2\nabla^2V_0. \end{split}$$
(1.22)

Tilsammen giver (1.21) og (1.22), at

$$\sum_{a} |\vec{p}_{ba}|^2 \left(E_a - E_b \right) = \frac{\hbar^2}{2} \langle b | \nabla^2 V_0(\vec{r}) | b \rangle.$$
(1.23)

Udtrykket for forskellen i selvenergien fås ved indsættelse af (1.20) og (1.23) i (1.19) til

$$\delta E_{\beta}' = \frac{e^2 \hbar}{12\varepsilon_0 c^3 \pi^2 m_0^2} \langle b | \nabla^2 V_0(\vec{r}) | b \rangle \ln \frac{m_0 c^2}{|\langle E_b - E_a \rangle|}.$$
 (1.24)

Da der jf. Poissons ligning [Reitz et al., 1993, s. 57] haves, at

$$\nabla^2 V_0(\vec{r}) = -e\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = e \frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_0}, \qquad (1.25)$$

hvor $\rho(\vec{r})$ er ladningstætheden og ε_0 er vakuumpermittiviteten, fås (1.24) til

$$\delta E'_{\beta} = \frac{e^3\hbar}{12\varepsilon_0^2 c^3 \pi^2 m_0^2} \langle b|\rho(\vec{r})|b\rangle \ln \frac{m_0 c^2}{|\langle E_b - E_a\rangle|}.$$
(1.26)

For et givet system med en kendt ladningstæthed, $\rho(\vec{r})$, og elektronbølgefunktion, ψ , er det vha. (1.26) muligt at bestemme Lambforskydningen for en elektron i tilstand b.

1.2 Elektronens elektromagnetiske masse

Som det blev nævnt i afsnit 1.1, skal selvenergien for en fri elektron trækkes fra selvenergien for en bundet elektron. Dette skyldes, at der skal tages højde for elektronens elektromagnetiske masse. Dette afsnit er ment til lette forståelsen af netop denne effekt og er skrevet på baggrund af [Haken, 1981, s. 244 - 246].

Fra (1.16) haves det, at selvenergien for en fri elektron med impuls \vec{p} kan skrives

$$\delta E_{\beta,0} = -\frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \vec{p}^2 \int_0^{E_0} \mathrm{d}E.$$
(1.27)

Det bemærkes her, at selvenergien for den frie elektron er proportional med \vec{p}^2 .

Betragt nu den kinetiske energi for en fri elektron uden en vekselvirkning med det elektromagnetiske felt. Det vil sige en "nøgen" elektron. Energien er da

$$E_{fri} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0},\tag{1.28}$$

hvor m_0 er den "nøgne" elektrons masse. Sammen med selvenergien i udtryk (1.27) er den totale energi givet ved

$$E_{fri} + \delta E_{\beta,0} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tag{1.29}$$

Udtrykket for selv energien i (1.27) kan derfor tolkes som en ændring i elektronens masse. Her tolkes m som elektronens samlede masse. Det vil sige den "nøgne" masse sammen med massebidraget fra vekselvirkningen med det elektromagnetiske felt, som elektronen er omgivet af.

Hvis elektronens masse findes ved et forsøg, vil det altid være elektronens samlede masse som måles. Dette skyldes, at elektronen altid vil være omgivet af et elektromagnetisk felt skabt af de virtuelle fotoner, som elektronen udsender og absorberer jf. figur 1.1 i afsnit 1.1. Grundet dette vil det ikke være muligt at måle elektronens "nøgne" masse, da elektronen ikke kan skilles fra dens elektromagnetiske felt. Det er derfor nødvendigt at lave en renormalisering, således at udtrykkene for elektronens energi tager højde for den elektromagnetiske masse.

Indsættes (1.28) og (1.27) i (1.29), gælder der for den samlede masse, at

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_0} + 2\tilde{a},\tag{1.30}$$

hvor

$$\tilde{a} = -\frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \int_0^{E_0} \mathrm{d}E.$$

Hamiltonoperatoren for en elektron, som vekselvirker med det elektromagnetiske felt, skrives normalt som

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}^2}}{2m_0} + V_0 + \hat{H}_I,$$

hvor V_0 er den potentielle energi, og \hat{H}_I beskriver vekselvirkningen mellem elektronen og det elektromagnetiske felt. Anvendes (1.30), fås der for Hamiltonoperatoren, at

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V_0 + \{\hat{H}_I - \tilde{a}\hat{\vec{p}}^2\},\tag{1.31}$$

Da det altid er den samlede masse af elektronen, som observeres, er det Hamiltonoperatoren i (1.31), som benyttes. Det er derfor vekselvirkningen givet ved

$$\hat{H}_I' = \{\hat{H}_I - \tilde{a}\hat{\vec{p}}^2\}$$

som skal betragtes. Det er således nødvendigt at trække middelværdien af $\tilde{a}\hat{p}^2$ fra vekselvirkningsleddet med \hat{H}_{I2} i (1.15). Dette svarer til at trække selvenergien for en fri elektron fra selvenergien for en bundet elektron, som det blev gjort i (1.17).

1.3 LAMBFORSKYDNINGEN I HYDROGENATOMET

Udtrykket for Lambforskydningen i (1.26) kan anvendes på hydrogenatomet, idet det antages, at protonen i hydrogenatomet er uendelig tung, hvorved der kan indlægges et koordinatsystem med protonen i origo, så protonen er i hvile ud fra en observators synspunkt. Fra elektrostatikken er den potentielle energi jf. [Reitz et al., 1993, s. 50-52] givet som

$$V_0(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

For hydrogenatomet antages det desuden, at ladningstætheden af kernen er fuldstændig lokaliseret i origo, hvorved $\rho(\vec{r}) = e\delta(\vec{r})$. Herved giver (1.26), at

$$\delta E_{\beta}' = \frac{e^4 \hbar}{12\varepsilon_0^2 c^3 \pi^2 m_0^2} |\psi_b(0)|^2 \ln \frac{m_0 c^2}{|\langle E_b - E_a \rangle|},\tag{1.32}$$

hvor $|\psi_b(0)|^2$ er sandsynligheden for at finde elektronen med bølgefunktion ψ_b i origo. Lad nu ψ_b være $2s_{1/2}$ -tilstanden i hydrogenatomet. Ifølge [Bethe, 1947, s. 341] er middelexcitationsenergien for denne tilstand givet ved

$$\langle E_b - E_a \rangle = 17, 8Ry, \tag{1.33}$$

hvor Rydbergs konstant $Ry = \frac{e^4 m_0}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}$. Der gælder jf. [Bethe, 1947], at

$$|\psi_{2s}(0)|^2 = \frac{1}{8\pi a_0^3},\tag{1.34}$$

hvor $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2}$ er Bohrradius. Indsættes (1.33) og (1.34) i (1.35), kan forskellen for selvenergien ud fra processen, β , regnes til

$$\delta E'_{\beta} = \frac{e^4 \hbar}{12 \varepsilon_0^2 c^3 \pi^2 m_0^2} \frac{1}{8\pi a_0^3} \ln \frac{m_0 c^2}{17, 8Ry} \approx 4,2940 \mu eV.$$
(1.35)

Den beregnede energi svarer til en frekvens på 1038MHz. Dette er i god overensstemmelse med [Bethe, 1947, s. 341], hvor frekvensen er blevet regnet til 1040MHz.

LAMBFORSKYDNINGEN I EN ELEKTRISK LEDENDE RING

Formålet med dette kapitel er at anvende teorien om Lambforskydningen fra kapitel 1 på en elektrisk ledende mesoskopisk ring. For at kunne gøre dette er det nødvendigt at kende elektrontilstandene for ringen. Disse tilstande vil først blive gennemgået, hvorefter Lambforskydningen kan beregnes og analyseres. Der laves også en beregning af Lambforskydningen i det specielle tilfælde, hvor ringens radius er meget større end dens bredde.

2.1 FRI-ELEKTRON-MODEL FOR EN RING

Elektrontilstandene for en elektrisk ledende mesoskopisk ring kan findes ved at anvende urelativistisk kvantemekanik. Betragt først en ring som på figur 2.1, hvor koordinatsystemet er valgt, således at origo ligger i ringens centrum, og ringens højde er parallel med z-aksen. På grund af ringens symmetrier kan det her være fordelagtigt at vælge et cylindrisk koordinatsystem.



Figur 2.1: På figuren ses en ring placeret med centrum i origo.

For en urelativistisk elektron, som bevæger sig i en mesoskopisk ring, kan Schrödingerligningen opstilles, hvorved der fås, at

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V_0(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$
(2.1)

Det antages her, at den potentielle energi $V_0(\vec{r}) = 0$ inde i ringen, hvorved elektronen er en fri partikel i den mesoskopiske ring. Det antages desuden, at den potentielle energi V_0 er uendeligt stor uden for ringen. Som det ses på figur 2.1, er ringens størrelser i cylinderkoordinater karakteriseret ved dens indre og ydre radius $r_0 \leq r \leq r_0 + d$ og dens højde og $-\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}$. Der haves således, at

$$V_0(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{for } r_0 \le r \le r_0 + d, \ -\frac{L}{2} \le z \le \frac{L}{2}, \ \phi \in \mathbb{R} \\ \infty & ellers \end{cases}$$
(2.2)

Der gættes på, at løsningen til (2.1) kan skrives på formen

$$\psi(r,\phi,z) = R(r)\Phi(\phi)Z(z).$$
(2.3)

Laplaceoperatoren i cylinderkoordinater er givet ved

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
(2.4)

Indsættes (2.3) og (2.4) i (2.1), fås der, at

$$\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\right]R(r)\Phi(\phi)Z(z) = -k^2R(r)\Phi(\phi)Z(z) \quad (2.5)$$

hvor $k^2 = \frac{2m_0\varepsilon}{\hbar^2}$. Omskriv nu (2.5), således at

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} \Phi(\phi) + \frac{1}{Z(z)} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} Z(z) + k^2 \end{bmatrix} R(r) = 0 \qquad (2.6)$$
$$\begin{bmatrix} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(r \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \right) - \frac{m^2}{r^2} - k_z^2 + k^2 \end{bmatrix} R(r) = 0$$

Da afhængigheden af ϕ og z indgår i hver sit led, kan disse led hver især sættes lig en konstant. Heraf ses det, at der opstår en ligning for r, ϕ , og z henholdsvis, hvorved de enkelte ligninger er uafhængige af hverandre.

For ligningen i z haves der, at

$$\frac{1}{Z(z)} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} Z(z) = -k_z^2,$$

hvor k_z^2 er en konstant. Der gættes på en løsning af formen $Z(z) = A_z \sin(k_z z + \theta)$. Idet der skal gælde, at $Z(\pm \frac{L}{2}) = 0$, og konstanten A_z er valgt således, at løsningen er normeret til én, haves der, at

$$Z(z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left[\frac{\pi l}{L}\left(z+\frac{L}{2}\right)\right], \quad l = 1, 2, \dots$$
(2.7)

Det bemærkes, at bølgefunktionen vil forsvinde, hvis l = 0. Derfor ses der bort fra denne løsning. Udtrykket for Z beskriver desuden en stående bølge, således ses der også bort fra løsninger med negative værdier for l, da fysikken for disse er den samme som for positive værdier af l.

For ligningen i ϕ fås der jf. (2.6), at

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} \Phi(\phi) = -m^2$$

Her er den normerede løsning givet ved

$$\Phi(\phi) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$
(2.8)

Det bemærkes her, at Φ beskriver en kompleks bølge, som bevæger sig i en retning, hvilken er afhængig af fortegnet af m.

For ligningen i r haves der jf. (2.6) samt (2.7) og (2.8), at

$$\frac{\mathrm{d}^2 R(r)}{\mathrm{d}r^2} + \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}R(r)}{\mathrm{d}r} + \left[k^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2 - \frac{m^2}{r^2}\right] R(r) = 0, \qquad (2.9)$$

Ifølge [Keller, 1997, s. 12330] er løsningen hertil givet ved

$$R(r) = AJ_m\left(\left[k^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}r\right) + BN_m\left(\left[k^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}r\right),\qquad(2.10)$$

hvor A og B er arbitrære normeringskonstanter, J_m er Besselfunktionen af første type, og N_m er Neumannfunktionen.

Pga. grænsebetingelserne for r skal der gælde, at $R(r_0) = R(r_0 + d) = 0$. Dvs., at

$$AJ_{m}\left(\left[k^{2} - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}r_{0}\right) + BN_{m}\left(\left[k^{2} - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}r_{0}\right) = 0 \qquad (2.11)$$
$$AJ_{m}\left(\left[k^{2} - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}(r_{0} + d)\right) + BN_{m}\left(\left[k^{2} - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}(r_{0} + d)\right) = 0$$

Da m og l er fastlagte, vil (2.11) kun være opfyldt for nogle værdier af k, som også vil afhænge af m og l. Derfor indføres nu kvantetallet n til at indicere disse værdier, således at $k = k_{n,l,m}$. En ikke-triviel løsning til det homogene ligningssystem i (2.11) kan findes, idet determinanten sættes lig nul. Der haves således, at

$$J_{m}\left(\left[k_{n,l,m}^{2}-\left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}r_{0}\right)N_{m}\left(\left[k_{n,l,m}^{2}-\left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}(r_{0}+d)\right)=$$
$$J_{m}\left(\left[k_{n,l,m}^{2}-\left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}(r_{0}+d)\right)N_{m}\left(\left[k_{n,l,m}^{2}-\left(\frac{\pi l}{L}\right)^{2}\right]^{\frac{1}{2}}r_{0}\right).$$

Indsættes (2.7), (2.8) og (2.10) i (2.3) er løsningen til Schrödingerligningen givet ved

$$\psi_{n,l,m}(r,\phi,z) = A_{n,l,m} \sin\left[\frac{\pi l}{L}\left(z+\frac{L}{2}\right)\right] e^{im\phi} \left\{ J_m \left(\left[k_{n,l,m}^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}r \right) - \frac{J_m \left(\left[k_{n,l,m}^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}r_0\right)}{N_m \left(\left[k_{n,l,m}^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}r_0\right)} N_m \left(\left[k_{n,l,m}^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}r \right) \right\},$$

hvor $n, l = 1, 2, \dots$ og $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, og den tilhørende energi til enhver tilstand er

$$E_{n,l,m} = \frac{\hbar^2}{2m_0} k_{n,l,m}^2.$$
 (2.12)

2.2 Selvenergien for en elektron i en ring

Med udgangspunkt i det generelle udtryk for en elektrons selvenergi fra kapitel 1, betragtes der i dette afsnit det tilfælde, hvor en elektron befinder sig i en mesoskopisk ring. Med de rette dimensioner for den mesoskopiske ring kan energiniveauerne for to tilstande i ringen antages at opfylde, at $mc^2 \gg E_a - E_b$. Den potentielle energi for denne ring er jf. (2.2) givet ved

$$V_0(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{for } r_0 \le r \le r_0 + d, \ -\frac{L}{2} \le z \le \frac{L}{2}, \ \phi \in \mathbb{R} \\ \infty & ellers \end{cases}$$

Idet ringen fyldes med elektroner vil en enkelt elektron have en potentiel energi, der er forskellige fra V_0 , da de resterende elektroner også bidrager til energien. Bølgefunktionen for den enkelte elektron vil naturlig også ændre sig, idet den nye potentielle energi tages i betragtning, dog ses der i det følgende bort fra denne ændring. Lad den nye potentielle energi være givet ved V'. Ifølge (1.23) kan det tilsvarende vises, at

$$\sum_{a} |\vec{p}_{ba}|^2 \left(E_a - E_b \right) = \frac{\hbar^2}{2} \langle b | \nabla^2 V'(\vec{r}) | b \rangle.$$

Som i udledningen af Lambforskydningen for hydrogen i afsnit 1.1 er forskellen i selvenergien for en elektron i en mesoskopisk ring jf. (1.24) givet ved

$$\delta E'_{\beta} = \frac{e^2 \hbar}{12\varepsilon_0 c^3 \pi^2 m_0^2} \langle b | \nabla^2 V'(\vec{r}) | b \rangle K, \qquad (2.13)$$

hvor

$$K = \ln \frac{m_0 c^2}{|\langle E_b - E_a \rangle|}.$$
(2.14)

Den nye potentielle energi, V', må nødvendigvis opfylde Poisons ligning, således at der jf. (1.25) gælder, at

$$\nabla^2 V'(\vec{r}) = -e\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = e \frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_0}.$$
(2.15)

Ladningstætheden, $\rho(\vec{r})$, består af et bidrag fra både de positive ladet atomkerner og de tilhørende negative ladet elektroner. Det antages, at det kun er de negative ledningselektronerne samt deres tilhørende positive ladninger i ringen, som bidrager til ladningstætheden. Det antages desuden, at de positive ladninger er "udsmurte" og dermed jævnt fordelt igennem hele ringen. Ladningstætheden af de positive ladninger i kernerne antages derfor at være konstant, ρ_+ . Ladningstætheden af de negative ladninger udgøres af alle ledningselektronerne på nær den, som befinder sig i tilstand b, for hvilken Lambforskydningen beregnes. Denne angives ved $\rho_{a\neq b}(\vec{r})$. Anvendes elektronernes bølgefunktioner kan ladningstætheden skrives

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{+} + \rho_{a \neq b}(\vec{r}) = \rho_{+} + \sum_{a \neq b} (-e) f_{a} |\psi_{a}(\vec{r})|^{2}, \qquad (2.16)$$

hvor f_a er Fermi-Diracfordelingen, som angiver sandsynligheden for, at tilstand a er besat. Fermi-Diracfordelingen er jf. [Kittel, 2005, s. 136] givet ved

$$f_a = \frac{1}{e^{\frac{E_a - \mu}{k_B T}} + 1},$$
(2.17)

hvor T er temperaturen, μ er det kemiske potential, og k_B er Boltzmanns konstant. Indsættes (2.15) og (2.16) i (2.13), fås der, at

$$\delta E'_{\beta} = \frac{e^{3}\hbar K}{12\varepsilon_{0}^{2}c^{3}\pi^{2}m_{0}^{2}} \langle b|\rho_{+} + \sum_{a\neq b} (-e)f_{a}|\psi_{a}(\vec{r})|^{2}|b\rangle.$$

I den mesoskopiske ring vil alle elektronernes energiniveauer blive forskudt, idet Lambforskydningen på hvert enkelt energiniveau medregnes. Når en elektron går fra en begyndelsestilstand, b = i, til en sluttilstand, b = f, vil Lambforskydningen for ændringen i elektronens energi være lig forskellen mellem Lambforskydning for de to energiniveauer. Lambforskydningen for elektronovergangen bliver derfor

$$\Delta W = \delta E'_{\beta,f} - \delta E'_{\beta,i}$$

$$= \frac{e^3 \hbar K}{12 \varepsilon_0^2 c^3 \pi^2 m_0^2} \left[\langle f | \rho_+ + \sum_{a \neq f} (-e) f_a | \psi_a(\vec{r}) |^2 | f \rangle - \langle i | \rho_+ + \sum_{a \neq i} (-e) f_a | \psi_a(\vec{r}) |^2 | i \rangle \right]$$

$$= \frac{e^4 \hbar K}{12 \varepsilon_0^2 c^3 \pi^2 m_0^2} \left[\langle i | \sum_{a \neq i} f_a | \psi_a(\vec{r}) |^2 | i \rangle - \langle f | \sum_{a \neq f} f_a | \psi_a(\vec{r}) |^2 | f \rangle \right].$$
(2.18)

Her indikerer index $i \equiv \{n_i, l_i, m_i\}$ begyndelsestilstanden og $f \equiv \{n_f, l_f, m_f\}$ sluttilstanden. Det er desuden blevet anvendt, at bølgefunktionerne er normeret, således at $\langle i|\rho_+|i\rangle = \langle f|\rho_+|f\rangle$. Lad $C = \frac{e^4\hbar K}{12\varepsilon_0^2 c^3\pi^2 m_0^2}$. Herved reduceres Lambforskydningen jf. (2.18) til

$$\Delta W = C \left[\sum_{a \neq i} \int f_a |\psi_a(\vec{r})|^2 |\psi_i(\vec{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r - \sum_{a \neq f} \int f_a |\psi_a(\vec{r})|^2 |\psi_f(\vec{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r \right] \quad (2.19)$$
$$= C \left[\sum_a f_a \left(\int |\psi_a(\vec{r})|^2 |\psi_i(\vec{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r - \int |\psi_a(\vec{r})|^2 |\psi_f(\vec{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r \right) - \int f_i |\psi_i(\vec{r})|^4 \, \mathrm{d}^3 r + \int f_f |\psi_f(\vec{r})|^4 \, \mathrm{d}^3 r \right]$$

Betragt nu en vilkårlig tilstand $\psi_a = \psi_{n,l,m}$, samt en bestemt tilstand $\psi_b = \psi_{n',l',m'}$. Da der jf. (2.3) gælder, at alle elektrontilstandene i ringen kan skrives på formen $\psi_{n,l,m}(r,\phi,z) = R_{n,l,m}(r)\Phi_m(\phi)Z_l(z)$, så er

$$\int |\psi_{n,l,m}(\vec{r})|^2 |\psi_{n',l',m'}(\vec{r})|^2 \, \mathrm{d}^3 r = \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n',l',m'}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \quad (2.20)$$
$$\times \int_0^{2\pi} |\Phi_m(\phi)|^2 |\Phi_{m'}(\phi)|^2 \, \mathrm{d}\phi$$
$$\times \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |Z_l(z)|^2 |Z_{l'}(z)|^2 \, \mathrm{d}z.$$

Med bølgefunktionerne fra (2.7) og (2.8) kan det desuden vises, at

$$\int_{0}^{2\pi} |\Phi_{m}(\phi)|^{2} |\Phi_{m'}(\phi)|^{2} d\phi = \frac{1}{2\pi}$$

$$I_{z}(l,l') \equiv \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |Z_{l}(z)|^{2} |Z_{l'}(z)|^{2} dz = \begin{cases} \frac{3}{2L} & \text{for } l = l' \\ \frac{1}{L} & \text{for } l \neq l' \end{cases}$$
(2.21)

Indsættes (2.20) og (2.21) i (2.19), haves der, at

$$\Delta W = \frac{C}{2\pi} \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_z(l,l_i) \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right) - I_z(l,l_f) \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right] - \frac{3}{2L} \int_{r_0}^{r_0+d} \left(f_{n_i,l_i,m_i} |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^4 - f_{n_f,l_f,m_f} |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^4 \right) r \, \mathrm{d}r \right].$$

For en ring med mange ledningselektroner kan der ses bort fra det sidste led, hvor det kun er den radiære begyndelses- og sluttilstanden, der integreres. Dette er muligt, da det sidste led i denne sammenhæng kun vil give et lille bidrag til Lambforskydningen.

2.3 Specialtilfælde

For en ring med en forholdsvis stor inderradius, r_0 , vil det være muligt at lave en approksimation af Lambforskydningen givet i (2.22). Hvis $r_0 \gg 0, d$ og ringens dimensioner i dens radiære retning er begrænset som $r_0 \leq r \leq r_0 + d$, så vil leddet med $\frac{1}{r}$ i (2.9) kunne undlades. Schrödingerligningen for den radiære bølgefunktion i (2.9) vil nu ligne Schrödingerligningen for en kvantebrønd. Der fås herved, at

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + \left[k^2 - \left(\frac{\pi l}{L}\right)^2 - \frac{m^2}{r^2}\right] R(r) = 0.$$

Den radiære bølgefunktion opfylder grænsebetingelserne $R(r_0) = R(r_0 + d) = 0$. Dette giver en kvantisering af den radiære bølgefunktion. Lad nu de forskellige bølgefunktioner være angivet ved *n*-kvantetallet. Det kan heraf vises, at

$$R_n(r) = \frac{2}{\sqrt{d(d+2r_0)}} \sin\left(\frac{n\pi}{d}(r-r_0-d)\right),$$
(2.23)

hvor $R_n(r)$ er normeret til én. Det er således muligt at lave approksimationen

$$R_{n,l,m} \approx R_n,$$

hvortil energiniveauerne jf, [Keller, 1997, s. 12330-12334] for ringen kan tilnærmes med

$$E_{n,l,m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0} \left(\frac{n^2}{d^2} + \frac{l^2}{L^2} + \frac{m^2}{\pi^2 r_0^2} \right).$$
(2.24)

Integrationen over r i udtryk (2.20) med approksimationen af den radiære bølgefunktion i (2.23) kan vises at give

$$I_r(n,n') \equiv \int_{r_0}^{r_0+d} |R_n(r)|^2 |R_{n'}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r = \begin{cases} \frac{3}{d(d+2r_0)} & \text{for } n = n' \\ \frac{2}{d(d+2r_0)} & \text{for } n \neq n' \end{cases}$$
(2.25)

Indsættes (2.25) i (2.22), fås der, at

$$\Delta W = \frac{C}{2\pi} \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_z(l,l_i) I_r(n,n_i) - I_z(l,l_f) I_r(n,n_f) \right) - \frac{9 \left(f_{n_i,l_i,m_i} - f_{n_f,l_f,m_f} \right)}{2Ld(d+2r_0)} \right].$$

Definer nu funktionen

$$I_{j,j'} \equiv \begin{cases} 3 & \text{for } j = j' \\ 2 & \text{for } j \neq j' \end{cases},$$

da kan Lambforskydningen reduceres til

$$\Delta W = \frac{C}{4\pi L d(d+2r_0)}$$

$$\times \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} I_{n,n_i} - I_{l,l_f} I_{n,n_f} \right) - 9 \left(f_{n_i,l_i,m_i} - f_{n_f,l_f,m_f} \right) \right].$$
(2.26)

Heraf ses det, at de enkelte led i Lambforskydningen alle er proportional med $\frac{1}{V}$, hvor rumfanget af ringen $V = L\pi((r_0 + d)^2 - r_0^2)$.

Ifølge modellen for Lambforskydningen er det kun ledningselektronernes tilstande, der summeres over i (2.26). Fra et teoretisk synspunkt antages det nu, at ringens temperatur er givet ved T = 0K. Da vil Fermi-Diracfordelingen

$$f_{n,l,m} = \begin{cases} 1 & \text{hvis tilstand } \{n,l,m\} \text{ er besat,} \\ 0 & \text{ ellers.} \end{cases}$$

Kendes ledningselektrontætheden, n_e , i ringen, så er antallet af ledningselektroner $N = n_e V$. Idet de besatte elektrontilstande er dem med lavest energi ifølge Fermi-Diracfordelingen, kan Lambforskydningen i (2.26) findes ved, at "fylde" de N elektroner i ringen, så de lavest liggende energiniveauer i ringen vil være besatte. Grænsen som adskiller besatte og ubesatte tilstande karakteriseres her ved en såkaldt "Fermiflade".

		n;	n _f										n
	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
l;	2	5	0	2	2	2	2	2	2	2	2	2	-
l _f	-2	0	-5	-2	-2	-2	-2	-2	-2	-2	-2	-2	
	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	0	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

Figur 2.2: Figuren viser en $n \times l$ matrix, hvor elementerne er givet ved $(I_{l,l_i}I_{n,n_i} - I_{l,l_f}I_{n,n_f})$. Den fede streg markerer en fiktiv Fermiflade for et fastholdt *m*-kvantetal. Tilstandene over stregen er besatte, og under stregen er de ubesatte.

Betragt nu summen i (2.26), hvori størrelsen $(I_{l,l_i}I_{n,n_i} - I_{l,l_f}I_{n,n_f})$ indgår. Ved at lave et simpelt diagram over denne størrelse for kvantetallene, n og l, ses det jf. figur 2.2, at det kun er elektrontilstande nær Fermifladen, som giver et bidrag til Lambforskydningen. Dette er åbenlyst, da de forskellige led i summen med størrelsen $(I_{l,l_i}I_{n,n_i} - I_{l,l_f}I_{n,n_f})$ optræder med et skiftende fortegn. Dette vil også gælde for lave temperature, hvor tilstande langt under Fermifladen tilnærmelsesvis vil være besatte med en sandsynlighed lig én. Tilsvarende vil der næsten ingen sandsynlighed være for at finde besatte tilstande langt over Fermifladen. Det er bl.a. også kendt fra faststoffysikken, at det er elektronerne nær Fermifladen, som bidrager til f.eks. metallers elektriske ledningsevne [Kittel, 2005, s. 135-141]. Da Lambforskydningen netop er en effekt, som jf. (2.16) er relateret til ledningselektronerne, synes det at være intuitiv rigtig, at Lambforskydningen stammer fra elektrontilstandene nær Fermifladen.

NUMERISKE RESULTATER

Der vil i dette kapitel blive præsenteret numeriske resultater for Lambforskydningen i en mesoskopisk ring. Først betragtes bestemte ringe af aluminium, hvor grafer for det generelle udtryk for Lambforskydningen i (2.22) sammenlignes med det tilnærmede udtryk i (2.26). Herefter betragtes nogle større ringe af galliumarsenid. Lambforskydningen for de to typer af ringe vil blive vist som en funktion af bredden, d, radius, r_0 , og temperaturen, T. Ringenes kemiske potential vil også kunne ses som en funktion af hhv. temperaturen, inderratius og bredden i nogle udvalgte ringe.

3.1 BEREGNING AF LAMBFORSKYDNINGEN I EN ELEKTRISK LEDENDE MESOSKOPISK RING

Med udgangspunkt i teorien for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring fra forrige kapitel, opstilles der nu et endeligt udtryk for Lambforskydningen som funktion af ringens rumlige dimensioner og temperatur. Ifølge (2.22) er det generelle udtryk for Lambforskydningen

$$\Delta W^{Gen} = \frac{C}{4\pi L} \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right.$$
(3.1)
$$- I_{l,l_f} \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right] - 3 \int_{r_0}^{r_0+d} \left(f_{n_i,l_i,m_i} |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^4 - f_{n_f,l_f,m_f} |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^4 \right) r \, \mathrm{d}r \right],$$

og jf. (2.26) er det tilnærmede udtryk

$$\Delta W^{Til} = \frac{C}{4\pi L d(d+2r_0)}$$

$$\times \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} I_{n,n_i} - I_{l,l_f} I_{n,n_f} \right) - 9 \left(f_{n_i,l_i,m_i} - f_{n_f,l_f,m_f} \right) \right],$$
(3.2)

hvor $C = \frac{e^4 \hbar K}{12 \varepsilon_0^2 c^3 \pi^2 m_0^2}$. Ifølge (2.14) er

$$K = \ln \frac{m_0 c^2}{|\langle E_b - E_a \rangle|},$$

hvor $\langle E_b - E_a \rangle$ er middelexcitationsenergien. Da det jf. (2.24) antages, at $\langle E_b - E_a \rangle \ll m_0 c^2$, sættes

$$K = \ln(m_0 c^2). \tag{3.3}$$

Læseren gøres derfor opmærksom på, at de følgende beregninger for Lambforskydningen for en mesoskopisk ring kan variere i forhold til evt. målte værdier. Bemærk desuden, at K er negativ.

De Broglie relationen mellem energi og frekvens giver jf. i [Eisberg og Resnick, 1985, s. 56], at frekvensændringen svarende til Lambforskydningen, ΔW , fås ved

$$\Delta \nu = \frac{\Delta W}{h},\tag{3.4}$$

hvor h er Plancks konstant.

Det er fra kvantemekanikken jf. [Gingrich, 2006, s. 82] kendt, at en elektron er en spin-1/2-partikel. Paulis udelukkelses princip giver jf. [Dahl, 2001, s. 260], at to elektroner ikke kan befinde sig i samme tilstand. Det antages derfor, at de beregnede tilstande i ringen fra Afsnit 2.1 hver kan indeholde to elektroner. For at korrigere for dette, ganges udtrykket for Lambforskydningen igennem med en faktor 2, idet der kan være dobbelt så mange elektroner i ringen i forhold til de beregnede tilstande.

Frekvensændringen for Lambforskydningen i det generelle og tilnærmede udtryk i (3.1) og (3.2) fås ved brug af (3.3) og (3.4) og ved at inkludere en faktor 2 for elektronens spin til

$$\Delta\nu^{Gen} = \frac{C_0}{L} \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right.$$
(3.5)
$$\left. - I_{l,l_f} \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right) \left. - 3 \int_{r_0}^{r_0+d} \left(f_{n_i,l_i,m_i} |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^4 - f_{n_f,l_f,m_f} |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^4 \right) r \, \mathrm{d}r \right],$$

og

$$\Delta \nu^{Til} = \frac{C_0}{Ld(d+2r_0)}$$

$$\times \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} I_{n,n_i} - I_{l,l_f} I_{n,n_f} \right) - 9 \left(f_{n_i,l_i,m_i} - f_{n_f,l_f,m_f} \right) \right],$$
(3.6)

hvor $I_{i,j} = 2 + \delta_{ij}$, og

$$C_0 = \frac{e^4 \ln(m_0 c^2)}{48\varepsilon_0^2 c^3 \pi^4 m_0^2}.$$

Tilsvarende er ringens elektroners energiniveauer for det generelle og det tilnærmede udtryk ifølge (2.12) og (2.24) givet ved

$$E_{n,l,m}^{Gen} = \frac{\hbar^2}{2m_0} k_{n,l,m}^2, \tag{3.7}$$

$$E_{n,l,m}^{Til} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0} \left(\frac{n^2}{d^2} + \frac{l^2}{L^2} + \frac{m^2}{\pi^2 r_0^2} \right).$$
(3.8)

De to udtryk for energiniveauerne vil hovedsagelig blive benævnt ved E^{Gen} og E^{Til} , hvorved tilstandsindexet undlades.

Fermi-Diracfordelingen er jf. (2.17) givet ved

$$f_{n,l,m} = \frac{1}{e^{\frac{E_{n,l,m}-\mu}{k_B T}} + 1}$$

Det kemiske potential, som indgår i $f_{n,l,m}$ kan bestemmes ved normeringen

$$N/2 = \sum_{n,l,m} f_{n,l,m},$$
 (3.9)

hvor N er antallet af ledningselektroner i ringen. N skal her halveres, da der er plads til to ledningselektroner i hver tilstand, $\{n, l, m\}$. Antallet af ledningselektroner kan bestemmes, idet ledningselektrontætheden, n_e , for ringens materiale og ringens rumfang er kendte. Der haves, at

$$N = n_e V, \tag{3.10}$$

hvor rumfanget $V = \pi L(d^2 + 2r_0d)$. Da der kun kan eksisterer et helt antal elektroner i ringen, og der tages højde for elektronens spin, rundes n_eV ned til nærmeste lige heltal. Da $E_{n,l,m}$ jf. Afsnit 2.1 afhænger af ringens rumlige dimensioner, fremgår det af (3.9) og (3.10), at $\mu = \mu(d, r_0, L, T, n_e)$.

Betragt elektronovergangen mellem to tilstande, $i = \{n_i, l_i, m_i\}$ og $f = \{n_f, l_f, m_f\}$, hvorom der gælder, at $n_i = n_f = n'$, $l_i = l_f = l'$ og $m_i \neq m_f$. Det tilnærmede udtryk for Lambforskydningen i (3.6) giver så

$$\Delta \nu_{m_i,m_f}^{Til} = \frac{9C_0}{Ld(d+2r_0)} \left(f_{n',l',m_f} - f_{n',l',m_i} \right).$$
(3.11)

I de tilfælde, hvor tilstanden, i, og tilstanden, f, er besatte med samme sandsynlighed, vil Lambforskydningen jf. (3.11) være lig nul. En "ren" *m*-elektronovergang vil derfor ikke blive betragtet nærmere. Da det er tynde ringe og ikke cylinderskaller, som Lambforskydningen ønskes beregnet for, vil det ofte gælde, at $L \leq d, r_0$. Det er således jf. (3.8) muligt at undertrykke *l*-kvantiseringen, hvorved ringens elektroner hovedsagelig vil befinde sig i en tilstand med l = 1. Tilbage er der så at undersøge en elektronovergang mellem to forskellige tilstande med hver sit *n*-kvantetal. For at holde det simpelt vil Lambforskydningen i de følgende afsnit blive betragtet for en elektronovergang mellem $\{n_i, l_i, m_i\} = \{1, 1, 0\}$ og $\{n_f, l_f, m_f\} = \{2, 1, 0\}$.

3.2 LAMBFORSKYDNINGEN I EN AL-RING

I en ring af aluminium (Al) med dimensionerne $r_0 = 10^{-9}m$ og $d = L = 10^{-10}m$ er ledningselektrontætheden jf. [Kittel, 2005, s. 139] givet ved $n_e = 18,06 \times 10^{28}m^{-3}$. Antallet af ledningselektroner i ringen er hermed

$$N = n_e V = n_e \pi L d(d + 2r_0)$$

= 18,06 × 10²⁸ m⁻³ \pi 10⁻¹⁰ m × 10⁻¹⁰ m (10⁻¹⁰ m + 2 × 10⁻⁹ m) \approx 10,

idet N rundes ned til nærmeste lige heltal.

For $T = 10^{-3}K \approx 0K$ vil det kun være de lavest liggende energiniveauer, som er besatte. Dette er også illustreret på figur 3.1, hvor energiniveauerne for de 10 ledningselektroner er blevet beregnet vha. det generelle og det tilnærmede udtryk i henholdsvis (3.7) og (3.8). Det er vigtigt at notere sig, at energiniveauerne for tilstandene med $m \neq 0$ har degenerationsgrad to, idet tilstandene for henholdsvis de positive og negative *m*-værdier giver det samme energiniveau. Inkluderes elektronens spin, vil én plottet *m*-tilstand på figuren kunne indeholde 4 elektroner. Tilstande med m = 0 ses let på figuren, idet disse er vist i forlængelse af kvantetallene, n og l. Energidiagrammer som disse læses fra venstre mod højre, og tilstandene på figuren fås ved at kombinere kvantetallene: n = 1, l = 1 og $m = 0, \pm 1, \pm 2$. Det bemærkes her, at figur (a) og (b) næsten er ens.



Figur 3.1: Her ses energiniveauerne for ledningselektronerne i en ring med dimensionerne $r_0 = 10^{-9}m$, $L = 10^{-10}m$ og $d = 10^{-10}m$, hvilket svarer til $N \approx 10$. Figur (a) er beregnet vha. E^{Gen} , og figur (b) er beregnet vha. E^{Til} .

Hvis d nu ændres til $10^{-9}m$, vil der være ca. 170 ledningselektroner i ringen. På figur 3.2 (b) for de besatte energiniveauer ses det, at de første fire *n*-tilstande er besatte. Det ses også *l*-kvantetallet kun optræder i forlængelse af *n*-kvantetallet, hvilket antyder, at det kun er de tilstande med l = 1, som er besatte. Dette godtgøres jf. forrige afsnit, da $L = 10^{-10}m < d, r_0 = 10^{-9}m$. Det bemærkes ved sammenligning med figur 3.2 (a), at der er en lille forskel mellem E^{Gen} og E^{Til} . Dette ses let, da E^{til} lader tilstande med n = 4 være besatte, hvorimod E^{Gen} kun går op til n = 3.

På figur 3.2 (c) og (d) er energiniveauerne for tilstandene $\{n, 1, 0\}$ plottet som funktion af d (de tynde kurver). Figur (c) er lavet ved brug af det generelle udtryk, E^{Gen} , og (d) ved det tilnærmede udtryk, E^{Til} . På de to figurer ses også det kemiske potential plottet som funktion af d (den fede kurve). Da temperaturen af ringen er sat til $10^{-3}K$ indikerer det kemiske potential beliggenheden af Fermienergien, som fås ved, at lade temperaturen gå mod 0K for det kemiske potential. Tilstande, hvis energiniveauer er lig eller mindre end Fermienergien, vil derfor være besatte.

Energidiagrammerne fra figur 3.2 (a) og (b) er dannet for den maksimale værdi af d på figur (c) og (d) henholdsvis. Ved sammenligning af (a) og (c) ses det, at det kemiske potential på (c) ved den maximale værdi af d ligger over tre n-tilstandes energiniveauer. Dette er netop de tre n-tilstandes energiniveauer, som er vist på (a), og som alle er besatte med elektroner. Tilsvarende for (b) og (d) ligger det kemiske potential over fire n-tilstandes energiniveauer. Lambforskydningen ses plottet som funktion af d på (e) og (f), som henholdsvis stammer fra $\Delta \nu^{Gen}$ i (3.5) og $\Delta \nu^{Til}$ i (3.6). Bemærk her, at Lambforskydningen er af størrelsesorden $10^9 Hz$.

Det ses på figur 3.2 (e) og (f), at Lambforskydningen for små d springer i størrelse i takt med, at d nærmer sig $4 \times 10^{-10}m$. Springene kan forklares ved, at d bliver stor nok til, at der kommer to nye elektroner i ringen, hvorved der skal summeres over et ekstra led



Figur 3.2: På (a) og (b) ses de besatte energiniveauer beregnet ved henholdsvis E^{Gen} og E^{Til} for en Al-ring, hvor $d = 10^{-9}m$. Dette svarer til en ring med $N \approx 170$. På (c) og (d) ses energiniveauerne beregnet ved henholdsvis E^{Gen} og E^{Til} og det kemiske potential som en funktion af d. (e) og (f) viser henholdsvis $\Delta \nu^{Gen}$ og $\Delta \nu^{Gen}$ som funktion af d. Fælles for alle graferne er, at $L = 10^{-10}m$, $r_0 = 10^{-9}m$ og $T = 10^{-3}K$.

i udtrykkene for Lambforskydningen i (3.5) og (3.6). Lambforskydningen ses desuden



Figur 3.3: På (a) og (b) ses de besatte energiniveauer beregnet ved henholdsvis E^{Gen} og E^{Til} for en Al-ring, hvor $d = 10^{-9}m$. På (c) og (d) ses energiniveauerne beregnet ved henholdsvis E^{Gen} og E^{Til} og det kemiske potential som en funktion af d. (e) og (f) viser henholdsvis $\Delta \nu^{Gen}$ og $\Delta \nu^{Gen}$ som funktion af d. Fælles for alle graferne er, at $L = 10^{-10}m$, $r_0 = 10^{-10}m$ og $T = 10^{-3}K$. På (a) og (b) er der således 68 ledningselektroner.

at falde indtil omkring $d = 4 \times 10^{-10} m$, hvorefter den pludselig begynder at stige. Ved sammenligning med figur (c) og (d), ses det kemiske potential at krydse energiniveauet for en ny *n*-tilstand ved ca. $d = 4 \times 10^{-10} m$. Stigningen i Lambforskydningen kan forklares ved, at ringen er blevet så stor, at elektronerne nu også besætter tilstande med $n = n_f = 2$. Ifølge $\Delta \nu^{Til}$ i (3.6) vil besættelsen af n_f -tilstanden bidrage med positive led i summen over tilstandene. Den kraftige stigning i Lambforskydningen aftager som d vokser. Dette skyldes, at der nu både besættes tilstande med n = 1 og n = 2, hvorimod der lige efter $d = 4 \times 10^{-10} m$ hovedsagelig besættes nye m-tilstande, for hvilke n = 2.

Beregningerne fra figur 3.2 med $d = 4 \times 10^{-10} m$ har vist, at

$$E_{1,1,0}^{Gen} \approx 6,4 \times 10^{-18} J$$
$$E_{2,1,0}^{Gen} \approx 7,5 \times 10^{-18} J$$

En elektronovergang fra $\{2, 1, 0\}$ til $\{1, 1, 0\}$ vil resulterer i en overskydende energi, svarende til energiforskellen mellem de to tilstande, ΔE . Frekvensen svarende til størrelsen af denne forskel er givet ved $\frac{|\Delta E|}{h} \approx 1,7 \times 10^{15} Hz$. Ringen indeholder her 54 ledningselektroner, som alle har fordelt sig i tilstandene, $\{1, 1, m\}$. Det vil sige, at $\{2, 1, 0\}$ er ubesat. Størrelsen af Lambforskydningen er desuden fundet til $|\Delta \nu^{Gen}| \approx 1,8 \times 10^9 Hz$. Størrelsen af Lambforskydningen i forhold til frekvensen for energiforskellen er herved ca. 10^{-6} . En evt. måling af Lambforskydningen vil i dette tilfælde kræve, at energien for elektronovergangen kan bestemmes med mere end seks betydende cifre.

Betragt nu en tænkt ring med dimensionerne $r_0 = 10^{-10}m$, $L = 10^{-10}m$ og $d = 10^{-9}m$, og som har temperaturen $T = 10^{-3}K$. På figur 3.3 (a) og (b) ses diagrammer for ringens besatte energiniveauer beregnet ved det generelle og det tilnærmede udtryk for energien. Det fremgår tydeligt af figuren, at energiniveauerne er forskellige, da diagrammet med E^{Gen} indeholder færre besatte *n*-tilstande end E^{Til} . Det ses også af figur 3.3 (a) og (b), at det nederste energiniveau varierer i størrelse. Da ringens inderradius, r_0 er her meget mindre end ringens bredde, d, vil der jf. afsnit 2.3 være stor forskel på beliggenheden af energiniveauerne beregnet ved E^{Gen} og E^{Til} . I dette tilfælde ses der også at være stor forskel på figur (c) og (d) for det kemiske potential, hvor bl.a. den tilnærmede kurve på (d) gennemgående stiger for $d \geq 3 \times 10^{-10}m$ i forhold til den generelle kurve på (c). Lambforskydningen på (e) og (f) ses tydeligt at være forskellige for $d \geq 3 \times 10^{-10}m$.

Den relative afvigelsen af det tilnærmede udtryk for Lambforskydningen fra det generelle udtryk er illustreret på figur 3.4, hvor (a) er dannet på baggrund af figur 3.2 og (b) er dannet på baggrund af figur 3.3. Afvigelsen er beregnet ved

$$Afv. = \left| \frac{\Delta \nu^{Til} - \Delta \nu^{Gen}}{\Delta \nu^{Gen}} \right|$$
(3.12)

Afvigelsen ses på figur (a) at være meget lille, idet $d \leq 4 \times 10^{-10}m$. På (a) er $r_0 = 10^{-9}m$. Det vil sige, at det tilnærmede udtryk kan anvendes, når d er mindre end ca. $\frac{1}{3}$ af r_0 . På (b) er $r_0 = 10^{-10}m$, og her ses afvigelsen at være større end 0,5 for langt de fleste værdier af d, som er større end 2×10^{-10} .

Det kan vises, at hvis der vælges en aluminium ring med dimensionerne $d = 10^{-9}m$, $L = 10^{-10}m$ og $2 \times 10^{-9}m \le r_0 \le 10^{-8}m$, så vil den relative afvigelse jf. (3.12) ikke overstige 10^{-3} . Det generelle og tilnærmede udtryk for en sådan ring ved $T = 10^{-3}K$ ses også på figur 3.5, hvor (a) og (b) viser de besatte tilstandes energiniveauer for



Figur 3.4: På figurerne ses afvigelsen af det tilnærmede udtryk for Lambforskydningen, $\Delta \nu^{Til}$, fra det generelle udtryk, $\Delta \nu^{Gen}$. (a) er lavet på baggrund af figur 3.2 og (b) er lavet på baggrund af figur 3.3

 $r_0 = 10^{-8}m$. Ved denne inderradius er der 114 ledningselektroner i ringen, og i dette tilfælde er der ingen synlig forskel på (a) og (b). Tilsvarende ses der kun en meget lille forskel på graferne (c) og (d) for det kemiske potential for $r_0 \leq 5 \times 10^{-9}m$. På (e) og (f) ses Lambforskydningen som funktion af r_0 . Det bemærkes her, at kurven for Lambforskydningen minder om første del af den fra figur 3.2 (e) og (f). Fælles for kurverne er, at det kun er tilstande med n = 1, som er besatte. De små spring i Lambforskydningen må således opstå, når flere elektroner tilføjes ringen, idet r_0 øges. Størrelsesordenen af Lambforskydningen ligger omkring 10^9Hz . Dette svarer ca. til $\frac{1}{1000}$ af Lambforskydningen for $2s_{1/2}$ -tilstanden i hydrogenatomet. For $r_0 = 10^{-8}m$ er ringens rumfang ca. $6600 \times 10^{-30}m^3$, hvilket i forhold til hydrogenatomets rumfang på ca. $62 \times 10^{-30}m^3$ er ca. 100 gange så stort.¹ Da $\Delta \nu^{Til} \propto 1/V$ synes størrelsen af Lambforskydningen i ringen at være sandsynlig.

For en ring i nano-området kan ringens dimensioner vælges så $d = 10^{-9}m$, $L = 10^{-9}m$ og $10^{-8}m \leq r_0 \leq 10^{-7}m$. For den mindste værdi af r_0 er der 1190 ledningselektroner i ringen, og for den maximale værdi er der 11404. Det bemærkes her, at $d \leq \frac{1}{10}r_0$, hvormed Lambforskydningen beregnes ved $\Delta \nu^{Til}$; se også figur 3.6. Rumfanget af denne store ring er i forhold til den lille ring fra figur 3.5 ca. 10^3 gange så stort. Da Lambforskydningen er omvendt proportional med rumfanget, kan det forventes, at Lambforskydningen for den store ring tilsvarende er 10^3 gange mindre end for den lille ring. Dog indeholder den store ring ca. 100 gange så mange elektroner som den lille ring, hvorved der vil være langt flere elektroner, som bidrager til Lambforskydningen. Det fremgår også af figur 3.6, at Lambforskydningen for den store ring er af størrelsesorden 10^8Hz , hvilket ca. er en faktor 10 fra den lille ring. Figur 3.6 viser også, at størrelsen af Lambforskydningen stiger, idet ringens inderradius nærmer sig $10^{-7}m$.

Lambforskydningen er jf. (3.5) og (3.6) afhængig af temperaturen. På figur 3.7 ses Lambforskydningen som funktion af temperaturen, hvor $0K \leq T \leq 300K$. Figur (a) viser, at Lambforskydningen langsomt stiger, idet temperaturen går fra 0K til 300K. Her er ringens dimensioner $r_0 = 10^{-8}m$, $L = 10^{-10}m$ og $d = 10^{-9}m$. Det ses desuden, at

¹Hydrogenatomet er her antaget at være kugleformet med radius $a_0 = 0,529 \times 10^{-10} m$ (Bohrradius).



Figur 3.5: Figur (a) og (b) viser de besatte energiniveauer beregnet ved henholdsvis E^{Gen} og E^{Til} for en Al-ring med $r_0 = 10^{-8}m$. På (c) og (d) ses energiniveauerne beregnet ved henholdsvis E^{Gen} og E^{Til} og det kemiske potential som en funktion af r_0 . (e) og (f) viser henholdsvis $\Delta \nu^{Gen}$ og $\Delta \nu^{Gen}$ som funktion af r_0 . Fælles for alle graferne er, at $d = 10^{-10}m$, $L = 10^{-10}m$ og $T = 10^{-3}K$. Dette giver 114 ledningselektroner på figur (a) og (b).



Figur 3.6: På grafen ses et plot af det tilnærmede udtryk for Lambforskydningen, $\Delta \nu^{Til}$, for en Al-ring som funktion af r_0 . Ringens dimensioner og temperatur er bestemt ved $d = 10^{-9}m$, $L = 10^{-10}m$ og $T = 10^{-3}K$. Antallet af ledningselektroner er for den mindste værdi af r_0 lig 1190, og for den maksimale værdi af r_0 er antallet lig 11404.



Figur 3.7: På graferne ses Lambforskydningen som funktion af temperaturen i roringe, hvor $L = 10^{-10}m$, $r0 = 10^{-8}m$. På figur (a) er $d = 10^{-9}m$, og på figur (b) er $d = 2 \times 10^{-9}m$.

størrelsesordenen af Lambforskydningen for alle de nævnte temperaturer er nogenlunde konstant på knap $10^8 Hz$. På figur (b) ses et tilsvarende plot af Lambforskydningen. Forskellen fra figur (a) er, at på figur (b) er $d = 2 \times 10^{-9}m$. Her ses Lambforskydningen at falde fra 0K og op til ca. 80K, hvorefter den stiger og til sidst flader ud, når temperaturen nærmer sig 300K. Igen her er størrelsesordenen af Lambforskydningen nogenlunde konstant $10^7 Hz$ for alle temperature op til 300K. Figur 3.7 viser, at Lambforskydningen stadig er en observerbar effekt ved stuetemperatur.

Betragt nu Lambforskydningen i en aluminium ring som funktion af bredden, d, hvor ringen ellers har samme dimensioner som på figur 3.7. Lad derfor $r_0 = 10^{-8}m$, $L = 10^{-10}m$ og $10^{-9}m \leq d \leq 2 \times 10^{-9}m$. Lambforskydningen betragtes nu for temperaturerne 0K, 100K, 200K og 300K, hvilket ses på figur 3.8 (a) til (d). For 0K ses Lambforskydningen at springe, idet antallet af elektroner er afhængig af d. Følges udviklingen fra (a) til (d), hvor temperaturen ender med at være 300K, ses det, at springene udjævnes, som temperaturen stiger. Dette kan forklares ved at betragte Fermi-Diracfordelingen, som indgår i summen for $\Delta \nu^{Til}$ i (3.6). For T = 0K giver Fermi-Diracfordelingen en endelig grænse for hvilke af ringens tilstande, som bidrager til Lambforskydningen. Derimod vil højere temperaturer, hvor T = 300K, inddrage alle tilstandene, som hver især får tilknyttet en besættelsessandsynligheden. Her vil der i princippet være uendelig mange led i summen i $\Delta \nu^{Til}$, hvilket resulterer i en udglatning af kurven for Lambforskydningen.



Figur 3.8: På graferne ses Lambforskydningen for en Al-ring som funktion af d, hvor $L = 10^{-10}m$ og $r0 = 10^{-8}m$. På (a) er $T = 10^{-3}K \approx 0K$, og fra (a) til (d) stiger T i intervaller af 100K, således at T = 300K på (d).

3.3 LAMBFORSKYDNINGEN I EN GAAS-RING

I dette afsnit vil der kun blive betragtet ringe for hvilke $d < 3r_0$. Lambforskydningen og ringens energiniveauer vil derfor blive beregnet ud fra de tilnærmede udtryk, dvs. $\Delta \nu^{Til}$ og E^{Til} .

I en elektrisk ledende ring lavet af galliumarsenid er tætheden af ledningspartikler afhængig af doteringen, som bestemmes af forholdet mellem antallet af Ga-atomer og antallet af As-atomer i ringen. Tætheden af ledningspartikler sættes jf. [Kittel, 2005, s. 186] til $10^{22}m^{-3}$, og er dermed noget lavere end for aluminium. Det forholder sig sådan, at As-atomerne bidrager med elektroner og Ga-atomerne bidrager med positive huller til ledningstætheden. En GaAs-ring med dimensionerne $d = 10^{-8}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$ vil ifølge (3.10) kun indeholde 2 ledningselektroner (eller huller). Det forventes derfor, at eventuelle spring i Lambforskydningen for en GaAs-ring ved $T \approx 0K$ vil være relativt mere tydelige end for en Al-ring.



Figur 3.9: På (a) og (b) ses energiniveauerne og det kemiske potential for en GaAs-ring, hvor $L = 10^{-8}m$, $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$ og $T = 10^{-3}K$. Figur (c) viser Lambforskydningen som funktion af d, hvor $0m \le d \le 10^{-7}m$, hvilket svarer til at antallet af ledningselektroner opfylder, at $0 \le N \le 34$. Figur (d) viser et udsnit af (c), hvor ringen besættes med 18 ledningselektroner.

På figur 3.9 ses grafer for det kemiske potential og Lambforskydningen som funktion af d for en GaAs-ring. Ringens dimensioner er på figur (a) og (c) givet ved $0m \le d \le 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$. Ringens temperatur er sat til $T = 10^{-3}K \approx 0K$. Det ses af figur (c), at kurven for Lambforskydningen springer, når d bliver større. Figur (d) er et udsnit af figur (c) omkring $d = 6 \times 10^{-8}m$.

Det fremgår tydeligt, at springet i Lambforskydningen på figur 3.9 (d) skyldes, at der tilføjes yderligere to ledningselektroner til ringen. Punktet på grafen omkring $d = 6 \times 10^{-8}$ svarer præcis til den værdi af d, for hvilken antallet af ledningselektroner ifølge (3.10) giver et lige heltal uden afrunding. Figur (b) indikerer også de to ekstra ledningselektroner i ringen, idet energiniveauerne for alle tilstandene er medtaget (de tynde kurver). Det kemiske potential (den fede kurve) springer netop samme sted på kurven som Lambforskydningen på (d), hvorved det kemiske potential bliver sammenfaldende med et af energiniveauerne. Da $T \approx 0K$ vil alle energiniveauerne lig eller mindre end det kemiske potential være besatte. I det laveste energiniveau er der plads til to ledningselektroner, og i de resterende er der plads til fire. Ved at tælle er der derfor 18 ledningselektroner i ringen inden springet, og efter er der 20. Dette kan også anskues ved at tælle antallet af punkter på figur (c), idet det vides, at den mindste værdi af d giver det første punkt, som beskriver en ring med to ledningselektroner.

Betragt nu en GaAs-ring, hvor $d = 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$. Energiniveauerne for tilstand $\{1, 1, 0\}$ og $\{2, 1, 0\}$ er her jf. (3.8) fundet til

$$E_{1,1,0}^{Til} \approx 6,08 \times 10^{-22} J$$
$$E_{2,1,0}^{Til} \approx 6,27 \times 10^{-22} J$$

Disse ses også skitseret på figur 3.12 (b). En elektronovergang fra $\{1, 1, 0\}$ til $\{2, 1, 0\}$ vil svare til en frekvensforskel, $\frac{|\Delta E|}{\hbar} \approx 1,71 \times 10^{11} Hz$. Hvis ringens temperatur er givet ved $T = 10^{-3}K$, så er størrelsen af Lambforskydningen jf. figur 3.9 (c) givet ved $|\Delta \nu_{GaAs}^{Til}| \approx 112 Hz$. frekvensforskellen fra elektronovergangen i forhold til størrelsen af Lambforskydningen er da ca. $1,53 \times 10^9$. Dette er omtrent 1000 gange så stort som forholdet fundet for eksemplet med en ring af aluminium under afsnit 3.2. Energiniveauerne kræves derfor noget bedre bestemt for GaAs-ringen end for Al-ringen, hvis Lambforskydningen ønskes observeret.

Størrelsen af Lambforskydningen for Al-ringen er jf. afsnit 3.2 blevet fundet til $|\Delta \nu_{Al}^{Gen}| \approx 1,8 \times 10^9 Hz$. Det fremgår heraf, at størrelsen af Lambforskydningen for Al-ringen er ca. 10^7 gange større end for GaAs-ringen. Denne faktor kan forklares ved at betragte rumfanget for Al-ringen, V_{Al} , og rumfanget for GaAs-ringen, V_{GaAs} , hvilke er fundet til

$$V_{Al} = 3,02 \times 10^{-28} m^3,$$

 $V_{GaAs} = 3,46 \times 10^{-21} m^3.$

Det ses her, at rumfanget af GaAs-ringen er ca. 10^7 gange så stort som rumfanget af Al-ringen. Da Lambforskydningen er omvendt proportional med ringens rumfang, tolkes ringens rumfang til at spille den afgørende rolle for en eventuel måling af Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring.

Med udgangspunkt i en GaAs-ring med samme dimensioner som fra figur 3.9 vil Lambforskydningen nu blive undersøgt nærmere, idet den afbildes som funktion af d for forskellige temperaturer; se figur 3.10. For en ring med kun to ledningselektroner som på figur 3.10 (a), vil det sidste led i (3.6) for $\Delta \nu^{Til}$ være af stor betydning. Der må for denne ring gælde, at for T = 0K vil $f_{1,1,0} = 1$. De to elektroner vil derfor befinde sig i tilstand $\{1, 1, 0\}$. I dette tilfælde ses det, at $\Delta \nu^{Til} > 0$. Kun en lille positiv temperaturændring i ringen vil føre til, at $f_{1,1,0} < 1$, og dermed vil det positive bidrag til Lambforskydningen blive mindre. På figurerne fra (a) til (d) stiger temperaturen fra $10^{-3}K$ til 1K, og for de mindste værdier af d ses Lambforskydningen at ændre sig fra ca. 90Hz til -90Hz. Fra figur (a) til (c) synes Lambforskydningen for $d \approx 10^{-7}m$



Figur 3.10: Graferne viser Lambforskydningen for en GaAs-ring med $0m \le d \le 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$. På (a) er $T = 10^{-3}K$, på (b) er $T = 10^{-2}K$, på (c) er $T = 10^{-1}K$, og på (d) er T = 1K.

derimod at være uændret. Dette kan skyldes, at det sidste led i (3.6) med $f_{1,1,0}$ ikke spiller en så stor rolle, hvis ringen indeholder mange elektroner. Fra figur (c) til (d) gælder dette ikke længere. Her ses Lambforskydningen at stige for store d men ikke for små.

Det er jf. afsnit 3.2 kendt, at spring i Lambforskydningen for en Al-ring forsvinder, når ringens temperatur stiger. Betragtes figur 3.11 fra (a) til (d), ses kurven for Lambforskydningen at ændre form, men derudover ses det også, at størrelsen af springene bliver mindre, idet temperaturen går fra 10K til 100K. Figur 3.10 og 3.11 viser blandt andet, at springene i Lambforskydningen for de store værdier af d nær $10^{-7}m$ hurtigt bliver mindre, hvorimod springene for de små d-værdier halter efter. For store d bliver størrelsen af Lambforskydningen desuden mindre under temperaturstigningen. Dette skyldes sandsynligvis, at der for $d \approx 10^{-7}m$ ca. er 34 ledningselektroner i ringen til forskel fra 2 ledningselektroner ved $d \approx 10^{-8}m$. En stigning i temperaturen vil derfor medføre, at de 34 elektroner fordeler sig ud over ringens andre energiniveauer.

På figur 3.12 (a) ses Fermi-Diracfordelingen, f_a , for ringen med 34 ledningselektroner for både $T = 10^{-3}K$ og T = 1K. Ved T = 1K ses Fermi-Diracfordelingen at bredde sig



Figur 3.11: Graferne viser Lambforskydningen for en GaAs-ring med $0m \le d \le 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$. På (a) er T = 5K, på (b) er T = 10K, på (c) er T = 50K, og på (d) er T = 100K.

ud over mange energiniveauer. Da d er relativ stor i ringen vil der være en stor sandsynlighed for, at tilstand $\{2, 1, 0\}$ er besat. Dette skyldes, at den relative store værdi af dmedfører, at n-tilstandene vil ligge tæt, og derfor har større mulighed for at blive besat af elektroner. Modsvarende vil små værdier af d medføre en stor afstand mellem ntilstandene, hvorved tilstandene for n > 1 kun besættes med meget lille sandsynlighed, idet T < 100K. Antag nu at tilstand $\{2, 1, 0\}$ er besat med samme sandsynlighed som tilstand $\{1, 1, 0\}$. Ifølge figur 2.2, som skitserer leddene $(I_{l,l_i}I_{n,n_i} - I_{l,l_f}I_{n,n_f})$, vil der være mulighed for, at de enkelte led parvist ophæver hinanden. Ligeledes vil også tilstand $\{1, 1, 0\}$ og $\{2, 1, 0\}$ kunne ophæve hinandens bidrag til Lambforskydningen. Dermed vil størrelsen af Lambforskydningen blive mindre. Dette forklarer, hvorfor Lambforskydningen på figur 3.11 synes at gå hurtigere mod nul for store d end for små d, når temperaturen stiger fra 1K til 100K.

For en GaAs-ring med faste dimensioner ønskes Lambforskydningen og ringens kemiske potential nu bestemt som funktion af temperaturen. Ringens dimensionerne vælges, så der præcist er et helt antal ledningselektroner i ringen. Det vil sige, at antallet af ledningselektroner, N, ikke er rundet ned, men er et lige heltal. For N = 2 er kan ringens dimensioner vælges til $d \approx 6,3262 \times 10^{-9}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$.



Figur 3.12: På (a) ses Fermi-Diracfordelingen, f_a , for $T = 10^{-3}K$ og T = 1K. Kurven for $T = 10^{-3}K$ danner tilnærmelsesvis et rektangel med første- og andenaksen, og kurven for T = 1K ses som en skrå linje. Figuren er lavet for en GaAs-ring med dimensionerne: $d = 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$. (b) viser ringens besatte energiniveauer for $T = 10^{-3}K$. (a) og (b) giver tilsammen et indblik i antallet af tilstande, der bidrager til Lambforskydningen for T = 1K.

På figur 3.13 (a) og (b) ses henholdsvis Lambforskydningen og det kemiske potential som funktion af temperaturen for ringen med N = 2. Det bemærkes her, at der er sammenfald mellem figur (a) for Lambforskydningen og figurerne 3.10 og 3.11, idet det første punkt fra venstre på disse alle er for den samme ring med N = 2.

Kurven for Lambforskydningen på figur 3.13 (a) ses som tidligere nævnt at falde kraftigt, idet temperaturen går fra $10^{-3}K$ til 1K, herefter ses kun en meget svag stigning i kurven indtil T = 100K. På figur (b) synes det kemiske potential derimod at falde jævnt under hele temperaturstigningen. Det kemiske potential ses også at være tilnærmelsesvis sammenfaldende med ringens laveste energiniveau, $E_{1,1,0}$, for $T = 10^{-3}K$. Dette passer med, at det kemiske potential går mod Fermienergien for temperaturen gående mod 0K, hvorved de besatte tilstande de dem, hvis energiniveauer er lig eller mindre end det kemiske potential. Det lavest liggende energiniveau er jf. (3.8) ikke afhængige af temperaturen og ses derfor som en vandret linje.

På figur 3.13 (c) og (d) ses grafer for Lambforskydningen og det kemiske potential for en GaAs-ring, som fra figur (a) og (b), hvorimod $d \approx 1,2574 \times 10^{-8}m$, hvilket svarer til N = 4. På (e) og (f) ses tilsvarende grafer dog med $d \approx 1,8747 \times 10^{-8}m$, hvorved N = 6. Størrelsen af Lambforskydningen ses at blive mindre, desto større T og N er. For N = 6 bemærkes det, at kurven for Lambforskydningen flader ud, idet temperaturen går fra ca. 50K til 100K. Det er dog usikkert, om størrelsen af Lambforskydningen vil stige igen for højere temperaturer, da de enkelte tilstande parvist vil kunne ophæve hinanden jf. afsnit 2.3. De tre grafer, som viser kurverne for det kemiske potential, ser ens ud på nær en parallelforskydning langs anden aksen. Størrelsen af det kemiske potential for $T = 10^{-3}K$ følger beliggenheden af ringens energiniveauer. Da der er forholdsvist få elektroner i de tre ringe, vil det kemiske potential ligge nær det laveste energiniveau. Ifølge udtrykket for E^{Til} i (3.8) vil energiniveauerne ligge lavere, når r_0 og L fastholdes, og d gøres større. Dermed vil det kemiske potential også ligge lavere, når d og dermed N bliver større.



Figur 3.13: Graferne til venstre viser Lambforskydningen som funktion af temperaturen, og graferne til højre viser det tilhørende kemiske potential for en GaAs-ring med $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$. På (a) og (b) er $d \approx 6,3262 \times 10^{-9}m$, hvorved N = 2. På (c) og (d) er $d \approx 1,2574 \times 10^{-8}m$, dvs. N = 4. På (e) og (f) er $d \approx 1,8747 \times 10^{-8}m$, dvs. N = 6.

PERSPEKTIVERING

Formålet med denne afsluttende del er at give en relevant perspektivering med henblik på at kunne forbedre teorien om Lambforskydningen i en mesoskopisk elektrisk ledende ring. Først vil en teori, hvori elektronens spin indgår, blive betragtet. Herefter vil ringens potentielle energi blive diskuteret. Til sidst gives der et indblik i, hvordan en udvidet relativistisk teori for Lambforskydningen kan konstrueres.

4.1 LAMBFORSKYDNINGEN FOR EN RING I ET EKSTERNT MAGNETFELT

I afsnit 3.1 bliver det nævnt, at elektronen er en spin-1/2-partikel, og grundet dette vil enhver tilstand i en ring kunne besættes af to elektroner. Hvis modellen for Lambforskydningen kunne udvides til at tage højde for, at ringen er placeret i et eksternt homogent magnetfelt, \vec{B} , da vil elektronens spin kunne være med til, at en tilstands energiniveauer vil dele sig i to. Dette skyldes jf. [Kittel, 2005, s. 303], at en elektron med det magnetiske dipolmoment, $\vec{\mu}$, i et eksterne magnetfelt, \vec{B} , får energien,

$$E_{mag} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}.$$

For en elektron er $|\vec{\mu}| \approx \frac{e\hbar}{2m_0}$. Det ses heraf, at en elektron med et dipolmoment, som er parallel med magnetfeltet, vil have en mindre energi end en elektron, hvis dipolmoment er antiparallel med feltet.

Betragt nu Lambforskydningen i en ring for en elektronovergang mellem to *m*-tilstande, og hvor $r_0 \gg d$. Ifølge udtryk (3.11) er Lambforskydningen givet ved

$$\Delta \nu_{m_i,m_f}^{Til} = \frac{9C_0}{Ld(d+2r_0)} \left(f_{n',l',m_f} - f_{n',l',m_i} \right).$$

Dette udtryk antyder, at en elektronovergang fra $m_i = -1$ til $m_f = 1$ vil resulterer i, at Lambforskydningen giver nul, idet $f_{n',l',-1} = f_{n',l',1}$. Hvis ringen derimod er placeret i et eksternt magnetfelt, så vil energiniveauerne for tilstand $\{n',l',1\}$ og $\{n',l',-1\}$ begge være delt i to. Ved en elektronovergang er det således muligt, at elektronen går fra en tilstand med lav energi $\{n',l',-1\}^{\text{lav}}$ til en med høj energi $\{n',l',1\}^{\text{høj}}$ eller omvendt. Da Fermi-Diracfordelingen afhænger af energien, vil $f_{n',l',-1}^{\text{lav}} \neq f_{n',l',1}^{\text{høj}}$ for T > 0, og derfor vil Lambforskydningen være forskellig fra nul. Grundet dette vil en observation af Lambforskydningen for en ring med kendte dimensioner indirekte kunne fortælle noget om ringens *m*-tilstande igennem størrelsen af $f_{n',l',m_f} - f_{n',l',m_i}$.

4.2 DEN POTENTIELLE ENERGI

En forbedret teori for Lambforskydningen i en mesoskopisk elektrisk ledende ring vil kunne opnås, hvis ringens potentielle energi, V_0 , kunne bestemmes bedre. Ifølge afsnit 2.1 er den potentielle energi blevet sat lig nul inde i ringen og lig uendelig uden for ringen. Denne energi er så jf. afsnit 2.2 blevet modelleret, idet ringens elektroner også bidrager til energien. Den nye potentielle energi, V', er herefter blevet anvendt i teorien for Lambforskydningen. Det bemærkes her, at en ny potentiel energi, V', vil medføre, at elektronbølgefunktionerne for ringen må regnes for V', og det burde således være disse nye bølgefunktioner, som indgår i udledningen af Lambforskydningen. Men bølgefunktionerne beregnet ved V' vil igen give en elektron tæthed i ringen, som derfor modellerer V'. Den potentielle energi og elektronbølgefunktionerne indgår således i en iterativ proces, som forhåbentlig resulterer i, at Lambforskydningen konvergerer. Et større antal iterationer vil herved give en mere nøjagtig værdi af Lambforskydningen.

En anden mulighed for at lave en forbedret teori for Lambforskydningen vil være hvis det fra starten antages, at elektronerne i ringen er et mange-legeme problem. Antages der at være N elektroner i ringen, så vil elektronernes indbyrdes vekselvirkning jf. [Dahl, 2001, s. 357] kunne godtgøres ved at betragte Hamiltonoperatoren givet ved

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_i^2 + V_0\left(\vec{r_i}\right) \right] + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{i< j}^{N} \frac{1}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|}$$

Her er $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r_i}-\vec{r_j}|}$ Coulomb vekselvirkningen mellem den *i*'te og den *j*'te elektron. Bølgefunktionen, som denne Hamiltonoperator virker på, kan så beskrives ved en samlet bølgefunktion for de N elektroner. En teori som tager højde for dette, vil fra begyndelsen kunne give en god beskrivelse af elektronbølgefunktionerne.

Endelig er det også en mulighed for at lave en forbedring af teorien for Lambforskydningen, hvis den potentielle energi, V_0 , udvides til at være afhængig af ringens atomare opbygning. Det kan her antages, at ringens gitterstruktur er kendt, og at atomkernerne er fastholdte i ringens gitter. Den potentielle energi vil så kunne modelleres ved Coulomb vekselvirkningen mellem atomkernerne i gitteret og elektronen. Det vil sige

$$V_0(\vec{r_i}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{k}^{N_a} \frac{Z_k}{|\vec{r_i} - \vec{R_k}|}$$

hvor N_a er antallet af atomkerner, og Z_k og \vec{R}_k henholdsvis angiver antallet af positive ladninger og positionen af den k'te atomkerne. Den potentielle energi vil desuden kunne antages at være periodisk igennem gitteret, hvorved det jf. [Kittel, 2005, s. 167] er muligt at beskrive elektronbølgefunktionerne ved Blochfunktioner.

4.3 Relativistisk Lambforskydning

En relativistisk beregning af Lambforskydningen for en elektrisk ledende mesoskopisk ring kan findes, idet Diracligningen anvendes til at beskrive elektronerne i ringen; se også [Kroll og Willis E. Lamb, 1949, s. 388-398]. Betragt nu et system, som er en mesoskopisk ring med N elektroner, som vekselvirker med et elektromagnetisk felt.

Diracligningen for en elektron som vekselvirker med et elektromagnetisk felt er jf. [Gingrich, 2006, s. 78] givet ved

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[c\vec{\alpha}\cdot\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) - eA_0 + \beta mc^2\right]\psi \tag{4.1}$$

hvor \vec{A} er vektorpotentialet og A_0 er skalarpotentialet. Der gælder desuden, at $\vec{\alpha} = \alpha_1 \vec{i} + \alpha_2 \vec{j} + \alpha_3 \vec{k}$, hvor α_j og β er 4×4 matricer. Ifølge [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 409-410] kan disse matricer skrives

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

hvor σ_i er de sædvanlige 2 × 2 Paulimatricer og 1 er identitetsmatricen givet ved

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

Diracligningen for en elektron kan udvides til at kunne beskrive N elektroner. Til den eksisterende Hamiltonoperator i Diracligningen kan der tilføjes en Hamiltonoperatoren for det frie elektromagnetiske felt, \hat{H}_R , som netop beskriver de fotoner, som elektronerne er omgivet af. Dirac-Hamiltonoperatoren, \hat{H}_D , for hele systemet bestående af N elektroner samt de tilhørende fotoner er jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 197] og [Kroll og Willis E. Lamb, 1949, s. 388] givet ved

$$H_D = H_P + H_R + H_I,$$

hvor

$$\hat{H}_P = \sum_{i=1}^{N} \left[c\vec{\alpha}_i \cdot \hat{\vec{p}} + \beta_i m c^2 + V_0(\vec{r}_i) \right]$$
$$\hat{H}_R = \sum_{\vec{q},\varepsilon} \hbar \omega_\varepsilon(q) \left(\hat{a}_\varepsilon^+(\vec{q}) \, \hat{a}_\varepsilon(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right)$$
$$\hat{H}_I = \sum_{i=1}^{N} e\vec{\alpha}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{e^2}{|\vec{r}_{ij}|}$$

Her er \hat{H}_P således Hamiltonoperatoren for Dirac-partiklerne, dvs. elektronerne i ringen, og \hat{H}_I er den Hamiltonoperator som beskriver vekselvirkningen mellem elektroner og fotoner. Det bemærkes ved sammenligning af \hat{H}_D og (4.1), at eA_0 giver anledning til en potentiel energi, som består af to bidrag, hvoraf det ene er den statiske potentielle energi, V_0 , og hvoraf det andet er den potentielle Coloumbenergi, $\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_{ij}|}$, som der opstår mellem elektronerne. Da vakuumfluktuationer jf. [Kroll og Willis E. Lamb, 1949] ikke anses for at have stor betydning for Lambforskydningen, kan der i \hat{H}_R ses bort fra det sidste led.

En relativistisk beregning af Lambforskydningen kan findes ved at kvantisere Diracbølgefunktionerne. Dette giver jf. [Cohen-Tannoudji et al., 1989, s. 414] en beskrivelse af mange Dirac-partikler (Dirac-feltet). I [Kroll og Willis E. Lamb, 1949] er Lambforskydningen fundet for hydrogenatomet, og det er blevet vist, at forskellen i energiniveauerne for tilstand $2s_{\frac{1}{2}}$ og $2p_{\frac{1}{2}}$ er 1052MHz. Den eksperimentelle værdi er jf. [Gingrich, 2006, s. 297] blevet målt til $(1057.77\pm0.10)MHz$, og derfor er den relativistiske beregning en forbedring i forhold til den urelativistiske beregning i [Bethe, 1947], hvor Lambforskydningen er fundet til 1040MHz. Ligeledes kan metode fra [Kroll og Willis E. Lamb, 1949] tænkes anvendt på en elektrisk ledende mesoskopisk ring, hvorved teorien for Lambforskydningen forbedres.

KONKLUSION

Det overordnede formål med dette projekt har været at give en begyndende forståelse for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Med udgangspunkt i [Bethe, 1947] er der i kapitel 1 blevet fundet frem til, at selvenergien for en elektron jf. (1.19) er givet ved

$$\delta E_{\beta}' = \frac{e^2}{6\varepsilon_0 \hbar c^3 \pi^2 m_0^2} \sum_a |\vec{p}_{ba}|^2 \left(E_a - E_b\right) \ln \frac{m_0 c^2}{|E_b - E_a|},\tag{5.1}$$

hvor $\vec{p}_{ba} = \langle b | \hat{\vec{p}} | a \rangle$. Herunder er blevet vist, hvorledes selvenergien for en fri elektron skal trækkes fra selvenergien for en bundet elektron, og der er blevet indført en afskæringsfrekvens, cQ_C , hvorved selvenergien bliver endelig og dermed ikke divergerer. Ved brug af (5.1) er Lambforskydningen for $2s_{1/2}$ -tilstanden i hydrogenatomet fundet til ca. 1040*MHz*. Dette resultat er også fundet i [Bethe, 1947], og ved at anvende den samme metode er det lykkedes at opstille et udtryk for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring. Denne Lambforskydning gælder for en elektron, som overgår fra en begyndelsestilstand til en sluttilstand i ringen.

Det er blevet vist, at Lambforskydningen for en ring med en temperatur, T, på 0K er en effekt, som skyldes de elektroner i ringen med energier nær Fermienergien. Når T = 0K vil elektroner med meget lavere energi ikke bidrage til Lambforskydningen. Dette gælder dog ikke altid for de elektroner, som måtte befinde sig i elektronovergangens begyndelses- eller sluttilstand. For T > 0K vil elektronerne med de laveste energier i ringen få større indflydelse på størrelsen Lambforskydningen.

Der er blevet fundet frem til et generelt og et tilnærmet udtryk for Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring, som henholdsvis er givet ved

$$\Delta\nu^{Gen} = \frac{C_0}{L} \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right. \\ \left. - I_{l,l_f} \int_{r_0}^{r_0+d} |R_{n,l,m}(r)|^2 |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^2 r \, \mathrm{d}r \right) \\ \left. - 3 \int_{r_0}^{r_0+d} \left(f_{n_i,l_i,m_i} |R_{n_i,l_i,m_i}(r)|^4 - f_{n_f,l_f,m_f} |R_{n_f,l_f,m_f}(r)|^4 \right) r \, \mathrm{d}r \right]$$

og

$$\Delta \nu^{Til} = \frac{C_0}{Ld(d+2r_0)} \times \left[\sum_{n,l,m} f_{n,l,m} \left(I_{l,l_i} I_{n,n_i} - I_{l,l_f} I_{n,n_f} \right) - 9 \left(f_{n_i,l_i,m_i} - f_{n_f,l_f,m_f} \right) \right],$$

hvor $C_0 = \frac{e^4 \ln(m_0 c^2)}{48 \varepsilon_0^2 c^3 \pi^4 m_0^2}$. Her er $I_{i,j} = 2 + \delta_{ij}$ og $f_{n,l,m}$ er Fermi-Diracfordelingen. Disse udtryk er i kapitel 3 blevet anvendt til at beregne Lambforskydningen for en elektronovergang i ringen fra tilstand $\{n_i, l_i, m_i\} = \{1, 1, 0\}$ til $\{n_f, l_f, m_f\} = \{2, 1, 0\}$. Det tilnærmede udtryk er fundet til at gælde for ringe med $r_0 \gg 0, d$.

For en lille Al-ring ved en temperatur $T = 10^{-3}K \approx 0K$ og med dimensionerne $d = 10^{-10}m$, $L = 10^{-10}m$ og $10^{-9}m \leq r_0 \leq 10^{-8}m$ er størrelsesordenen af Lambforskydningen jf. afsnit 3.2 fundet til 10^9Hz . Her er antallet af ledningselektroner for

den største værdi af r_0 fundet til 114. Ved sammenligning med Lambforskydningen for $2s_{1/2}$ -tilstanden i hydrogenatomet vurderes størrelsesordenen af Lambforskydningen for ringen til at være sandsynlig. Lambforskydningen for en Al-ring i nano-området med $d = 10^{-9}m$, $L = 10^{-9}m$ og $10^{-8}m \le r_0 \le 10^{-7}m$ er tilsvarende fundet til at være af størrelsesordenen 10^8Hz . Ved sammenligning med den lille Al-ring er også dette resultat vurderet til at være sandsynlig pga. forholdet mellem ringenes rumfang og dermed også antallet af elektroner i ringene.

For den lille Al-ring ved en temperatur imellem ca. 0K og 300K er størrelsesordenen af Lambforskydningen omkring $10^8 Hz$. En eventuel observation af Lambforskydningen kan derfor også finde sted ved stuetemperatur.

For $T \approx 0K$ er det blevet vist, at Lambforskydningen som funktion af inderradius, r_0 , eller bredden, d, springer i størrelse. Springene opstår, idet ringens rumfang gøres større. Det vil sige, at der tilføjes flere atomer til ringen og dermed også flere ledningselektroner. I udvalgte ringe er størrelsen af disse spring også vist at blive mindre og i nogle tilfælde at forsvinde, når temperaturen stiger. Dette gælder både for Al- og GaAs-ringe.

På grund af den lave tæthed af ledningselektroner (eller positive huller) i en GaAs-ring kræves det, at ringens rumfang er stort i forhold til Al-ringe, da Lambforskydningen er afhængig af antallet af ledningspartikler. For en GaAs-ring, hvor $d = 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$, $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$ og $T = 10^{-3}K$, er størrelsen af Lambforskydningen fundet til 112Hz. I den sammenhæng vurderes rumfanget af ringen til at være afgørende for størrelsen og en eventuel observation af Lambforskydningen, da det tilnærmede udtryk for Lambforskydningen er omvendt proportionalt med rumfanget.

For en GaAs-ring med $0m \leq d \leq 10^{-7}m$, $L = 10^{-8}m$ og $r_0 = 5 \times 10^{-7}m$ har det vist sig, at størrelsen af Lambforskydningen går mod ca. 0Hz, når temperaturen af ringen går fra ca. 0K til 100K. Tendensen har været den, at Lambforskydningen for de udvalgte GaAs-ringe med en stor bredde, d, og dermed mange ledningspartikler hurtigst går mod 0Hz. Forklaringen herpå er givet ved, at teorien for Lambforskydningen jf. $\Delta \nu^{Til}$ tillader, at de enkelte elektrontilstandes bidrag til Lambforskydningen parvist kan ophæve hinanden.

Der er i kapitel 4 blevet nævnt nogle forslag til en forbedret teori for Lambforskydningen i en ring. Det er her gjort klart, at den potentielle energi for en elektron i ringen kan optimeres. Udvides teorien for Lambforskydningen til at være afhængig af elektronens spin, vil der også være en mulighed for at studere ringe, som befinder sig i et eksternt magnetfelt. En forbedret relativistisk teorien kan også laves, hvis Lambforskydningen findes ved brug af Dirac-ligningen, ligesom det jf. [Kroll og Willis E. Lamb, 1949] er blevet gjort for Lambforskydningen i hydrogenatomet. Disse forbedringer bør overvejes ved videre studier af Lambforskydningen i en elektrisk ledende mesoskopisk ring.

PERTURBATIONSTEORI

A.1 STATIONÆR PERTURBATIONSTEORI

Stationær perturbationsteori anvendes i kvantemekanikken til at beskrive fysiske systemer, hvis Hamiltonoperator ikke afhænger eksplicit af tiden. Perturbationsteori knytter sig i denne sammenhæng til egenværdiproblemet beskrevet ved den tidsuafhængige Schrödingerligning. For et fysisk system, hvor der anvendes stationær perturbationsteori, ses der i første omgang kun på de effekter, som har størst indflydelse på systemet. Herefter kan virkningen af mindre effekter gradvist tilføjes, hvorved det bliver muligt at beskrive hele systemet. Teksten er skrevet på baggrund af [Cohen-Tannoudji et al., 1977, s. 1095-1104].

Perturbationsteori anvendes, når Hamiltonoperatoren kan skrives på formen

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}_0$$

hvor egenvektorerne og egenværdierne for \hat{H}_0 er kendte, og egenværdierne for \hat{W}_0 er meget mindre end dem for \hat{H}_0 . Her er \hat{H}_0 den ikke-perturberede Hamiltonoperator, og \hat{W}_0 er perturbationen.

Lad $\hat{W}_0 = \lambda \hat{W}$ hvor der for parameteren λ gælder, at $0 \leq \lambda \ll 1$. Herved fås der, at

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W.$$

Det ses, at for $\lambda = 0$, er Hamiltonoperatoren $\hat{H}(0) = \hat{H}_0$. Det er således muligt at variere styrken af perturbationen, idet λ varieres.

Det antages, at egenværdierne for den ikke-perturberede Hamiltonoperator giver anledning til et diskret spektrum. Da egenværdierne for den ikke-perturberede Hamiltonoperator antages at være kendte, haves der, at

$$\ddot{H}_0|\phi_p\rangle = E_p|\phi_p\rangle.$$
 (A.1)

Her er E_p den p'te egenværdi, og $|\phi_p\rangle$ er den tilhørende egenvektor. Egenvektorerne danner desuden en orthonormal basis, således at

$$\langle \phi_p | \phi_{p'} \rangle = \delta_{pp'} \tag{A.2}$$

$$\sum_{p} |\phi_{p}\rangle\langle\phi_{p}| = 1. \tag{A.3}$$

Da energiniveauerne, E_p , kan være degenereret, betragtes der i den følgende tekst kun ikke-degenereret energiniveauer. Idet Hamiltonoperatoren afhænger af parameteren λ , vil energiniveauerne og egentilstandene også afhænge af λ . Egenværdiproblemet er givet ved

$$\hat{H}(\lambda)|\psi\rangle = E(\lambda)|\psi\rangle.$$
 (A.4)

Det antages nu, at energiniveauerne, $E(\lambda)$, og egentilstandene, $|\psi(\lambda)\rangle$, kan skrives som en række, således at

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \ldots + \lambda^q \varepsilon_q + \ldots = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q$$
(A.5)

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \ldots + \lambda^{q}|q\rangle + \ldots = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^{q}|q\rangle.$$
(A.6)

Indsættes (A.5) i (A.4), fås der, at

$$\hat{H}(\lambda) \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right] = \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q \right] \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right].$$

Denne ligning skal gælde for små og vilkårlige værdier af lambda. Der opstår således en ligning for hver orden af λ . Det ses herved, at for λ af

• nulte orden:

$$\hat{H}_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle \tag{A.7}$$

• første orden:

$$(\hat{H}_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \tag{A.8}$$

• anden orden:

$$(\hat{H}_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0$$
(A.9)

• q'te orden:

$$(\hat{H}_0 - \varepsilon_0)|q\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|q - 1\rangle - \varepsilon_2|q - 2\rangle \dots - \varepsilon_q|0\rangle = 0$$

En egenvektor for et egenværdiproblem er kun givet på nær en konstant faktor. Det er derfor muligt at vælge konstanten således, at $|\psi(\lambda)\rangle$ er normeret til 1. Det er herudover muligt at vælge fasen af $|\psi(\lambda)\rangle$, således at $\langle 0|\psi(\lambda)\rangle$ er reel. Betragtes (A.6) haves der for λ regnet til nulte orden, at

$$\langle 0|0\rangle = 1. \tag{A.10}$$

For λ regnet til første orden ses det, at

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = (\langle 0 | +\lambda \langle 1 |) (|0\rangle +\lambda | 1\rangle) + O(\lambda^2) = \langle 0 | 0\rangle + \lambda (\langle 1 | 0\rangle + \langle 0 | 1\rangle) + O(\lambda^2)$$

Der må således gælde, at

$$\langle 1|0\rangle = \langle 0|1\rangle = 0. \tag{A.11}$$

Det indre produkt mellem andre tilstande kan tilsvarende bestemmes, idet større ordner af λ medtages.

A.2 Bestemmelse af energien til anden orden i λ

Det forholder sig sådan, at når energiniveauerne skal findes, så regnes der ofte kun til anden orden i λ . Dvs. for at kunne finde egenværdien for et ikke-degenereret energiniveau, så skal ε_0 , ε_1 og ε_2 bestemmes. Betragt nu et bestemt ikke-degenereret energiniveau, E_n , som er egenværdi for den ikke-perturberede Hamiltonoperator \hat{H}_0 , og som har den tilhørende egenvektoren, $|\phi_n\rangle$. Der gælder, at

$$H_0|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \tag{A.12}$$

For λ af nulte orden ses det vha. (A.5), at

$$\varepsilon_0 = E_n. \tag{A.13}$$

Hvis (A.12) herefter sammenlignes med (A.7), fremgår det desuden, at

$$|0\rangle = |\phi_n\rangle.$$

Det vil derfor være sådan, at egenværdien, $E_n(\lambda)$ for $\hat{H}(\lambda)$ går mod egenværdien, E_n , for \hat{H}_0 , idet $\lambda \to 0$.

For at bestemme ε_1 ganges (A.8) igennem med $\langle \phi_n |$ fra venstre, hvorved der fås, at

$$\langle \phi_n | (\hat{H}_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \phi_n | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 0 \rangle = 0.$$
 (A.14)

Da $|\phi_n\rangle = |0\rangle$ og operatoren \hat{H}_0 er hermitisk, giver det første led nul jf. (A.7). Dette ses let, da

$$\langle \phi_n | (\hat{H}_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle = \langle 0 | (\hat{H}_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle = \langle 0 | (\varepsilon_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle = 0$$

Ifølge (A.10) reduceres (A.14) til

$$\varepsilon_1 = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle. \tag{A.15}$$

For at bestemme ε_2 anvendes samme fremgangsmåde som ved bestemmelse af ε_1 . Gang således (A.9) igennem med $\langle \phi_n |$ fra venstre. Tilsvarende fås der, at

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | (\hat{H}_0 - \varepsilon_0) | 2 \rangle + \langle \phi_n | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 1 \rangle - \langle \phi_n | \varepsilon_2 | 0 \rangle &= 0 \\ \langle 0 | (\hat{H}_0 - \varepsilon_0) | 2 \rangle + \langle \phi_n | \hat{W} | 1 \rangle - \langle 0 | \varepsilon_1 | 1 \rangle - \langle 0 | \varepsilon_2 | 0 \rangle &= 0 \\ \langle 0 | (\varepsilon_0 - \varepsilon_0) | 2 \rangle + \langle \phi_n | \hat{W} | 1 \rangle - \varepsilon_1 \langle 0 | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle 0 | 0 \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Anvendes (A.10) og (A.11), ses det, at

$$\varepsilon_2 = \langle \phi_n | \hat{W} | 1 \rangle.$$
 (A.16)

Der er nu kun tilbage at bestemme $|1\rangle$. Dette gøres ved igen at betragte (A.8). Gang nu denne ligning igennem med $\langle \phi_p |$ fra venstre, hvor $p \neq n$. $|\phi_p\rangle$ er således alle de resterende egenvektorer, som sammen med $|\phi_n\rangle$ udgør en basis for løsningsrummet til egenværdiproblemet i (A.1). Der haves, at

$$\langle \phi_p | (\hat{H}_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \phi_p | (\hat{W} - \varepsilon_1) | \phi_n \rangle = 0.$$

Ifølge (A.1) og (A.13) ses det, at

$$\begin{split} \langle \phi_p | (E_p - E_n) | 1 \rangle + \langle \phi_p | (W - \varepsilon_1) | \phi_n \rangle &= 0 \\ (E_p - E_n) \langle \phi_p | 1 \rangle + \langle \phi_p | \hat{W} | \phi_n \rangle &= 0 \\ \langle \phi_p | 1 \rangle &= \frac{\langle \phi_p | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n - E_p}, \end{split}$$

idet $\langle \phi_p | \phi_n \rangle = 0$ for $p \neq n$ jf. (A.2). Ganges den fremkomme ligning igennem med $| \phi_p \rangle$, hvorefter der summes over alle $p \neq n$, fås der, at

$$\sum_{p \neq n} |\phi_p\rangle \langle \phi_p | 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \phi_p | W | \phi_n \rangle}{E_n - E_p} |\phi_p\rangle.$$

Da $\langle \phi_p | 1 \rangle = 0$ for p = n, haves der jf. (A.3), at

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \phi_p | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n - E_p} | \phi_p \rangle.$$

Ifølge (A.16) haves der således, at

$$\varepsilon_2 = \sum_{p \neq n} \frac{\left| \langle \phi_p | \hat{W} | \phi_n \rangle \right|^2}{E_n - E_p}.$$
(A.17)

Det er nu muligt at bestemme energien til anden orden i λ . Dette gøres ved at indsætte (A.13), (A.15) og (A.17) i (A.5), hvorved der for det bestemte energiniveau, $E_n(\lambda)$, fås at

$$E_n(\lambda) = E_n + \langle \phi_n | \hat{W}_0 | \phi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \frac{\left| \langle \phi_p | \hat{W}_0 | \phi_n \rangle \right|^2}{E_n - E_p} + O(\lambda^3).$$
(A.18)

LITTERATUR

- [Bethe, 1947] Bethe, H. A. (1947). The electromagnetic shift of energy levels. Physical Review, 72:339 - 341.
- [Cohen-Tannoudji et al., 1977] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. og Ialoë, F. (1977). Quantum Mechanics. Wiley-Interscience, 1. udgave. ISBN 0-471-16432-1.
- [Cohen-Tannoudji et al., 1989] Cohen-Tannoudji, C., Dupont-Roc, J. og Grynberg, G. (1989). Photons and Atoms - Introduction to Quantum Electrodynamics. Wiley-Interscience, 1. udgave. ISBN 0-471-84526-4.
- [Cohen-Tannoudji et al., 1992] Cohen-Tannoudji, C., Dupont-Roc, J. og Grynberg, G. (1992). Atom-Photon Interactions - Basic Processes and applications. Wiley-Interscience, 1. udgave. ISBN 0-471-62556-6.
- [Dahl, 2001] Dahl, J. P. (2001). Introduction to the Quantum World of Atoms and Molecules. World Scientific, 1. udgave. ISBN 981-02-4565-3.
- [Eisberg og Resnick, 1985] Eisberg, R. og Resnick, R. (1985). Quantum Physics of Atoms, Molecules, solids, Nuckei and Particles. Wiley, 2. udgave. ISBN 978-0-471-87373-0.
- [Gingrich, 2006] Gingrich, D. M. (2006). Practical Quantum Electrodynamics. CRC Press, Taylor and Francis, 1. udgave. ISBN 978-158488-542-9.
- [Haken, 1981] Haken, H. (1981). Light, volume 1 : waves, photons, atoms. North-Holland. ISBN 0-444-86020-7.
- [Keller, 1997] Keller, O. (1997). Angular-momentum photon-drag current in a mesoscopic metallic cylinder shell. *Physical Review B*, 56(19):12327 - 12338.
- [Kittel, 2005] Kittel, C. (2005). Introduction to Solid State Physics. Wiley, 8. udgave. ISBN 0-471-41526-X.
- [Kroll og Willis E. Lamb, 1949] Kroll, N. M. og Willis E. Lamb, J. (1949). On the self-energy of a bound electron. *Physical Review*, 75(3):388 - 398.
- [Lamb og Retherford, 1947] Lamb, W. E. og Retherford, R. C. (1947). Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Physical Review*, 72(3):241.
- [Reitz et al., 1993] Reitz, J. R., Milford, F. J. og Christy, R. W. (1993). Foundations of Electromagnetic Theory. Addison-Wesley, 4. udgave. ISBN 0-201-52624-7.