



NTNU – Trondheim
Norwegian University of
Science and Technology

Department of Physics

Examination paper for

TFY4250/FY2045 Quantum Mechanics 1

Academic contact during examination: Peter Berg

Phone: 735 93462

Examination date: December 18th, 2013

Examination time (from-to): 9:00-13:00

Permitted examination support material: Calculators, Rottmann (formula collection)

Other information: ---

Language: English, Norwegian (bokmål, nynorsk)

Number of pages: 8

Number of pages enclosed: 7

Checked by:

Date

Signature

ENGLISH VERSION:

- 1) Derive the equation

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

by using the definition

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi dx.$$

- 2) A particle of mass m moves within the one-dimensional potential ($\gamma > 0$)

$$V(x) = \begin{cases} \gamma x, & x \geq 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

- a) Using the trial function

$$\varphi(x) = \begin{cases} A x e^{-\alpha x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases},$$

compute the expectation value of the energy, $\langle H \rangle$.

- b) Why is this a good trial function?

- c) Using the variational method, what is an upper bound for the ground state energy?

- 3) A weak constant force F influences a linear harmonic oscillator, resulting in the following Hamiltonian

$$H = H_0 + H_1$$

with

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \text{and} \quad H_1 = -Fx.$$

- a) What are the energy corrections to first and second order?
b) Solve the problem exactly ("complete the square") and compare the results with part a). What do you notice?

Hint: For the eigenfunctions of H_0 , we have

$$\langle \psi_k^{(0)} | x | \psi_n^{(0)} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1} + \sqrt{n} \delta_{k,n-1} \}.$$

Also, we have $E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ and the second-order corrections

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

- 4) An electron is in the spin state

$$X = A \begin{pmatrix} 1 \\ 2i \end{pmatrix}.$$

- a) Determine the constant A by normalizing X .
b) If you measured S_z on this electron, what values could you get and what is the probability of each? What is the expectation value of S_z ?

- c) If you measured S_x on this electron, what values could you get and what is the probability of each? What is the expectation value of S_x ?

Hint: The Pauli spin matrices are given by

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- 5) A rectangular box with dimensions L_x and $L_y = L_z = L$ contains a particle with mass m . One of the walls of the box is a piston that can move, so that L_x can vary. The potential is equal to zero inside the box and infinite outside. The energy eigenfunctions of the box can be written in the form

$$\psi_{n_x n_y n_z} = A \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}.$$

If the piston moves slowly, a particle in the state $\psi_{n_x n_y n_z}$ will keep its quantum numbers, while the wave function changes form, because L_x changes.

- a) Find the energy eigenvalue of the state $\psi_{n_x n_y n_z}$, expressed in terms of the quantum numbers n_x, n_y, n_z . Assume that the particle is in the ground state, and show that the force onto the piston from the particle is

$$F_x = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_x^3}.$$

Hint: If the piston moves an infinitesimal distance dL_x , the particle will do an amount of work on the piston, at the expense of the particle energy.

- b) Suppose now that the box contains 8 non-interacting spin-1/2 particles with mass m , and that this many-particle system is in the ground state of this system, that is, it has the lowest possible total energy. What is then the force from the 8 particles onto the piston when $L_x = L$?

6) An unconventional application of the WKB method

About how long would it take for a can of beer at room temperature to topple over spontaneously as a result of quantum tunneling? State the time in years and simplify the expression as much as you can.

Hints: Treat the beer can as a uniform cylinder of mass m , radius R , and height h . As the can tips, let x be the height of the center of the object above its equilibrium position ($h/2$). The can topples when x reaches a critical value, corresponding to maximum potential energy.

Calculate the tunneling probability for $E = 0$ and use the formula for the lifetime

$$\tau = \frac{2R}{v} e^{2\gamma}$$

where

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx.$$

The velocity v can be estimated according to $\frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} k_B T$.

Use the following values: $h = 10$ cm, $R = 3$ cm, $m = 300$ g, $g = 9.8 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$, $T = 300$ K.

Also, we have $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js and $k_B = 1.4 \cdot 10^{-23}$ m² kg s⁻² K⁻¹.

BOKMÅL VERSION:

- 1) Utled ligningen

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \rangle$$

ved å benytte definisjonen

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi dx.$$

- 2) En partikkel med masse m beveger seg i det endimensjonale potensialet ($\gamma > 0$)

$$V(x) = \begin{cases} \gamma x, & x \geq 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

- a) Ved å benytte prøvelfunksjonen

$$\varphi(x) = \begin{cases} A x e^{-\alpha x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases},$$

beregn forventningsverdien av energien, $\langle H \rangle$.

- b) Hvorfor er dette en god prøvelfunksjon?

- c) Ved å benytte variasjonsmetoden, hva er en øvre grense for energien i grunntilstanden?

- 3) En svak, konstant kraft F påvirker en lineær harmonisk oscillator og resulterer i følgende hamiltonoperator,

$$H = H_0 + H_1$$

med

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \text{og} \quad H_1 = -Fx.$$

- a) Hva er energikorreksjonene til første og andre orden?
b) Løs problemet eksakt ("kompletter kvadratet") og sammenlign resultatene med punkt a). Hva legger du merke til?

Hint: For egenfunksjonene til H_0 har vi

$$\langle \psi_k^{(0)} | x | \psi_n^{(0)} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1} + \sqrt{n} \delta_{k,n-1} \}.$$

I tillegg har vi $E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ samt andre ordens korreksjonene

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n}^m \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

- 4) Et elektron er i spinntilstanden

$$X = A \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 2 & \end{pmatrix}.$$

- a) Bestem konstanten A ved å normere X .
b) Dersom du målte S_z for dette elektronet, hvilke verdier kunne du få, og hva er sannsynligheten for hver av disse? Hva er forventningsverdien av S_z ?

- c) Dersom du målte S_x for dette elektronet, hvilke verdier kunne du få, og hva er sannsynligheten for hver av disse? Hva er forventningsverdien av S_x ?

Hint: Pauli spinnmatrisene er gitt som

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- 5) En rektangulær boks med dimensjoner L_x og $L_y = L_z = L$ inneholder en partikkel med masse m . En av veggene i boksen er et bevegelig stempel, slik at L_x kan varieres. Potensialet er null inni boksen og uendelig utenfor. Boksens energieigenfunksjoner kan skrives på formen

$$\psi_{n_x n_y n_z} = A \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}.$$

Dersom stempelet beveger seg langsomt, vil en partikkel i tilstanden $\psi_{n_x n_y n_z}$ ha sine kvantetall bevart, mens bølgefunksjonen endrer form, siden L_x endrer seg.

- a) Finn energieigenverdien til tilstanden $\psi_{n_x n_y n_z}$ uttrykt ved kvantetallene n_x, n_y, n_z . Anta at partikkelen er i grunntilstanden, og vis at kraften fra partikkelen på stempelet er

$$F_x = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_x^3}.$$

Hint: Dersom stempelet flyttes en infinitesimal lengde dL_x , vil partikkelen gjøre et visst arbeid på stempelet, på bekostning av partikkelens energi.

- b) Anta nå at boksen inneholder 8 ikke-vekselvirkende spinn-1/2-partikler med masse m , og at dette mangepartikkelsystemet befinner seg i systemets grunntilstand, dvs systemet har lavest mulig total energi. Hva er da kraften fra de 8 partiklene på stempelet når $L_x = L$?

6) En ukonvensjonell anvendelse av WKB-metoden

Omtrent hvor lang tid ville det ta for en ølboks ved romtemperatur å velte spontant som en følge av kvantemekanisk tunnelering? Angi tiden i år, og forenkla uttrykket ditt så mye du kan.

Hint: Anta at ølboksen er en uniform sylinder med masse m , radius R , og høyde h . I det boksen velter, lar du x være høyden til boksens sentrum, målt fra likevektsposisjonen ($h/2$). Boksen velter når x når en kritisk verdi som tilsvarer maksimal potensiell energi.

Beregn tunneleringssannsynligheten for $E = 0$, ved å benytte formelen for levetiden,

$$\tau = \frac{2R}{v} e^{2\gamma}$$

der

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx.$$

Hastigheten v kan estimeres fra $\frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} k_B T$.

Bruk følgende tallverdier: $h = 10 \text{ cm}$, $R = 3 \text{ cm}$, $m = 300 \text{ g}$, $g = 9.8 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$, $T = 300 \text{ K}$.

Vi har dessuten $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ og $k_B = 1.4 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$.

NYNORSK VERSION:

1) Utled likninga

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \rangle$$

ved å nytte definisjonen

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi dx.$$

2) Ein partikkel med masse m beveger seg i det eindimensjonale potensialet ($\gamma > 0$)

$$V(x) = \begin{cases} \gamma x, & x \geq 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

a) Ved å nytte prøvefunksjonen

$$\varphi(x) = \begin{cases} A x e^{-\alpha x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases},$$

rekn ut forventingsverdien av energien, $\langle H \rangle$.

b) Kvifor er dette ein god prøvefunksjon?

c) Ved å nytte variasjonsmetoden, kva er ei øvre grense for energien i grunntilstanden?

3) Ei svak, konstant kraft F påverkar ein lineær harmonisk oscillator og resulterer i følgjande hamiltonoperator,

$$H = H_0 + H_1$$

med

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \text{og} \quad H_1 = -Fx.$$

a) Kva er energikorreksjonane til første og andre orden?

b) Løys problemet eksakt ("kompletter kvadratet") og samanlikn resultata med punkt a). Kva legg du merkje til?

Hint: For eigenfunksjonane til H_0 , har vi

$$\langle \psi_k^{(0)} | x | \psi_n^{(0)} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1} + \sqrt{n} \delta_{k,n-1} \}.$$

I tillegg har vi $E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ samt andre ordens korreksjonane

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n}^m \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

4) Eit elektron er i spinntilstanden

$$X = A \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 2 & \end{pmatrix}.$$

a) Bestem konstanten A ved å normere X .

b) Viss du målte S_z for dette elektronet, kva for verdiar kunne du få, og kva er sannsynet for kvar av disse? Kva er forventingsverdien av S_z ?

- c) Viss du målte S_x for dette elektronet, kva for verdiar kunne du få, og kva er sannsynet for kvar av disse? Kva er forventingsverdien av S_x ?

Hint: Pauli spinnmatrisene er gjeve som

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- 5) Ein rektangulær boks med dimensjonar L_x og $L_y = L_z = L$ inneheld ein partikkel med masse m . Ein av veggane i boksen er eit bevegeleg stempel, slik at L_x kan varieras. Potensialet er null inni boksen og uendeleg utanfor. Boksen sine energieigenfunksjonar kan skrivast på forma

$$\psi_{n_x n_y n_z} = A \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}.$$

Viss stempelet beveger seg langsamt, vil ein partikkel i tilstanden $\psi_{n_x n_y n_z}$ ha kvantetala sine bevart, medan bølgefunksjonen endrar form, sidan L_x endrar seg.

- a) Finn energieigenverdien til tilstanden $\psi_{n_x n_y n_z}$ uttrykt ved kvantetala n_x, n_y, n_z . Anta at partikkelen er i grunntilstanden, og vis at krafta fra partikkelen på stempelet er

$$F_x = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_x^3}.$$

Hint: Viss stempelet flytter seg ei infinitesimal lengd dL_x , vil partikkelen gjera eit visst arbeid på stempelet, på bekostning av partikkelen sin energi.

- b) Anta nå at boksen inneheld 8 ikkje-vekselverkande spinn-1/2-partiklar med masse m , og at dette mangepartikkelsystemet befinn seg i systemet sin grunntilstand, dvs systemet har lågast mogleg total energi. Kva er då krafta frå dei 8 partiklane på stempelet når $L_x = L$?

6) Ein ukonvensjonell bruk av WKB-metoden

Omtrent kor lang tid ville det ta for ein ølboks ved romtemperatur å velte spontant som ei følgje av kvantemekanisk tunnelering? Angje tida i år, og forenkla uttrykket ditt så mykje du kan.

Hint: Anta at ølboksen er ein uniform sylinder med masse m , radius R , og høgd h . I det boksen veltar, lar du x vera høgda til boksen sitt sentrum målt frå jamvektsposisjonen ($h/2$). Boksen veltar når x når ein kritisk verdi som tilsvarar maksimal potensiell energi.

Rekn ut tunneleringssannsynet for $E = 0$, ved å nytta formelen for levetida,

$$\tau = \frac{2R}{v} e^{2\gamma}$$

der

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx.$$

Hastigheiten v kan estimerast frå $\frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} k_B T$.

Bruk følgjande talverdiar: $h = 10 \text{ cm}$, $R = 3 \text{ cm}$, $m = 300 \text{ g}$, $g = 9.8 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$, $T = 300 \text{ K}$.

Vi har dessutan $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ og $k_B = 1.4 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$.

Formulas:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$