

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:

Navn: Jan Myrheim

Telefon: 73 59 36 53, mobil 90 07 51 72

Eksamen i fag TFY4205 Kvantemekanikk II

Mandag 13. august 2012

Tid: 9.00–13.00

Sensurfrist: Mandag 27. august 2012

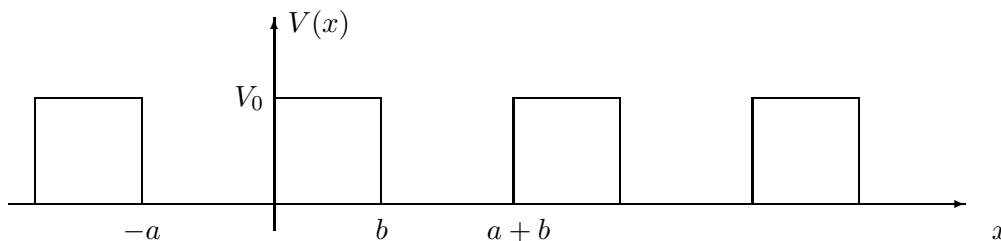
Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematiske og fysiske tabeller.

En tabell over fysiske konstanter finnes sist i dette oppgavesettet.
Alle deloppgaver teller likt ved sensuren.

Oppgave 1:

En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt kassepotensial som vist i figur 1. Potensialet er periodisk med periode $L = a + b$, det vil si at $V(x) = V(x + L)$. Vi innfører en konstant $\gamma > 0$ slik at

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} .$$



Figur 1: Et endimensjonalt periodisk kassepotensial med periode $L = a + b$.

a) Vi ønsker å løse den tidsuavhengige Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) .$$

For de verdiene av x der potensialet $V(x)$ er diskontinuerlig, må vi forlange at både bølgefunksjonen $\psi(x)$ og dens deriverte $\psi'(x)$ er kontinuerlige. Hvorfor?

b) Vi prøver å finne en løsning på formen

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \cos(\alpha x) + B_1 \sin(\alpha x) & \text{for } -a \leq x \leq 0, \\ A_2 \cos(\beta x) + B_2 \sin(\beta x) & \text{for } 0 \leq x \leq b, \\ A_3 \cos(\alpha(x-a-b)) + B_3 \sin(\alpha(x-a-b)) & \text{for } b \leq x \leq a+b, \end{cases}$$

der $\alpha > 0, \beta > 0, A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$ er konstanter.

Hva blir sammenhengen mellom energien E og konstantene α og β ?

Hvorfor må $E > V_0$ for at dette skal være en løsning?

Hvordan vil en tilsvarende løsning se ut for $0 < E < V_0$?

c) Vis følgende sammenheng mellom koeffisientene A_1, B_1 og A_3, B_3 :

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}$$

der

$$\begin{aligned} T_{11} &= \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \frac{\beta}{\alpha} \sin(\alpha a) \sin(\beta b), \\ T_{12} &= \sin(\alpha a) \cos(\beta b) + \frac{\alpha}{\beta} \cos(\alpha a) \sin(\beta b), \\ T_{21} &= -\sin(\alpha a) \cos(\beta b) - \frac{\beta}{\alpha} \cos(\alpha a) \sin(\beta b), \\ T_{22} &= \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \frac{\alpha}{\beta} \sin(\alpha a) \sin(\beta b). \end{aligned}$$

Merk at matrisen

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

har determinant 1 (du behøver ikke gjennomføre utregningen her):

$$\det \mathbf{T} = T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} = 1.$$

La λ_1 og λ_2 være egenverdiene til matrisen $\mathbf{T}$. Det karakteristiske polynomet er

$$\begin{vmatrix} T_{11} - \lambda & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (T_{11} + T_{22})\lambda + 1 = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2).$$

Dette viser at $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ og at

$$\lambda_1 + \lambda_2 = T_{11} + T_{22} = 2 \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right) \sin(\alpha a) \sin(\beta b).$$

Hvis enten $|\lambda_1| > 1$ eller $|\lambda_2| > 1$, så vil $\psi(x)$ vokse eksponensielt i en eller begge av grensene $x \rightarrow \pm\infty$, og det gir ingen mening. Derfor må vi forlange at $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$, og det betyr at det må finnes en $k > 0$ slik at

$$\lambda_1 = e^{ikL}, \quad \lambda_2 = e^{-ikL}.$$

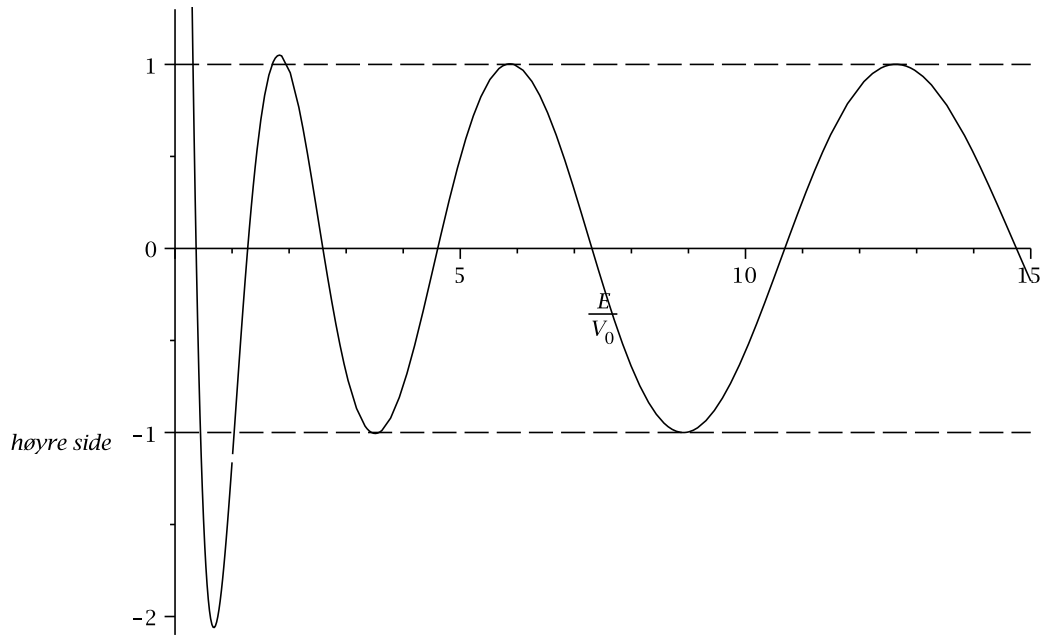
Da blir $\lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos(kL)$ og følgelig

$$\cos(kL) = \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \left(\frac{\beta}{2\alpha} + \frac{\alpha}{2\beta} \right) \sin(\alpha a) \sin(\beta b) . \quad (1)$$

Vi kan se på dette som en ligning som skal løses for k . Høyresiden i ligningen er en funksjon av energieigenverdien E .

Husk at vi utledet ligning (1) under forutsetning av at $E \geq V_0$. Den tilsvarende ligningen for $0 \leq E \leq V_0$ ser slik ut:

$$\cos(kL) = \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + \left(\frac{\beta}{2\alpha} - \frac{\alpha}{2\beta} \right) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) . \quad (2)$$



Figur 2: Høyre side av ligningene (1) og (2) som funksjon av E/V_0 .

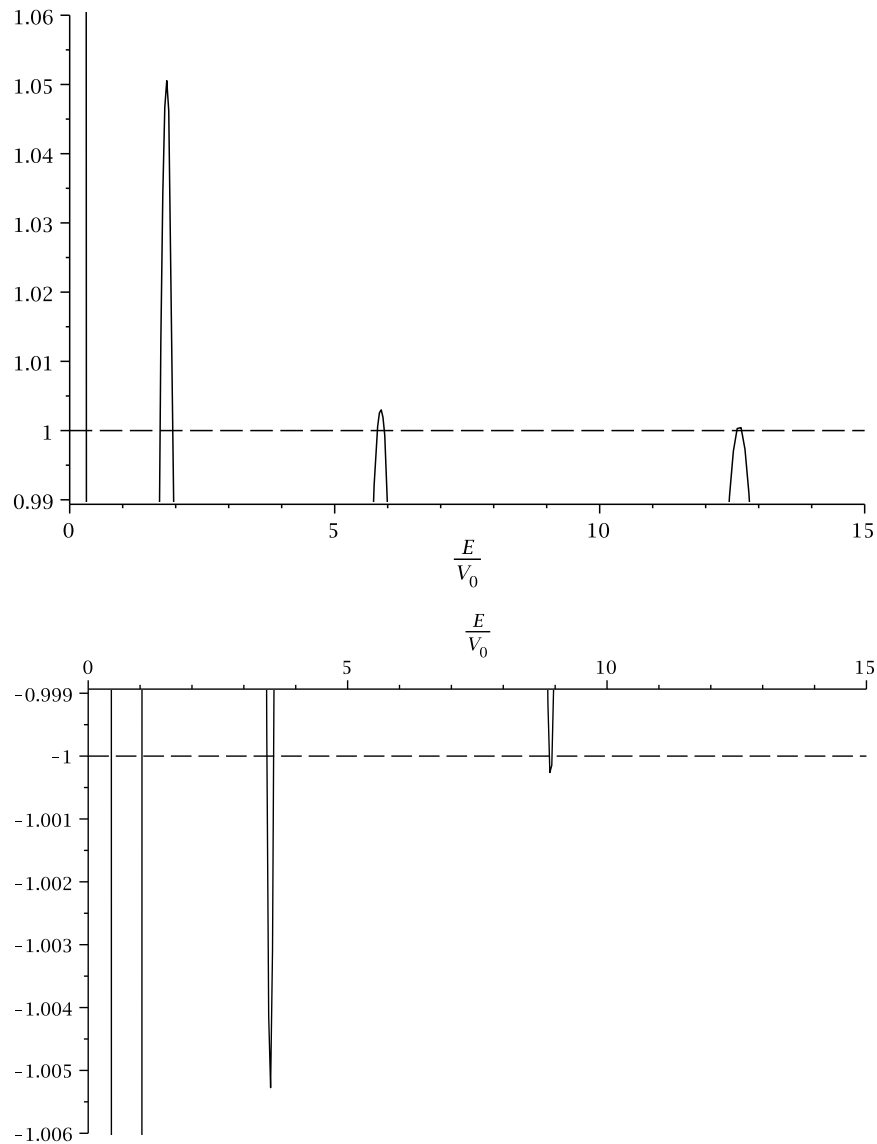
- d) Figur 2 viser høyre side av ligning (1) som funksjon av E/V_0 , for $E \geq V_0$, og høyre side av ligning (2) som funksjon av E/V_0 , for $0 \leq E \leq V_0$. Figuren er tegnet med $a = 3a_0$ og $b = 2,4a_0$ der a_0 er den naturlige lengdeenheten til potensialet,

$$a_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}} .$$

Figur 3 viser to utsnitt av figur 2 med sterkt forstørret vertikalakse.

Figurene viser at energispektret har en båndstruktur, med tillatte og forbudte energintervall. Forklar hvordan vi ser dette av figurene.

Les ut av figurene hvilke bånd av tillatte energieigenverdier som finnes mellom $E = 0$ og $E \approx 15V_0$. Les ut omtrentlige numeriske verdier for nedre og øvre grense til hvert energibånd.



Figur 3: Høyre side av ligningene (1) og (2) som funksjon av E/V_0 .

e) Energispektret i et periodisk tredimensjonalt potensial viser tilsvarende båndstruktur.

Forklar kort (men noenlunde fullstendig) hvordan båndstrukturen kan forklare at noen stoffer blir elektriske ledere, mens andre blir halvledere eller isolatorer.

Oppgave 2:

Vi ser på to partikler i en endimensjonal boks med bredde a , der potensialet er

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{når} \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \infty & \text{ellers} . \end{cases}$$

Vi antar at en av partiklene er i grunntilstanden, beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) & \text{når } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

og egenenergien

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2.$$

Den andre partikkelen er i den første eksiterte tilstanden, beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\psi_2(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) & \text{når } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

og egenenergien

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2.$$

I denne oppgaven kan du få bruk for følgende integral:

$$\begin{aligned} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du \, u^2 \cos^2 u &= \frac{\pi^3}{24} - \frac{\pi}{4}, \\ \int_{-\pi}^{\pi} du \, u^2 \sin^2 u &= \frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2}, \\ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du \, u \cos u \sin(2u) &= \frac{8}{9}. \end{aligned}$$

- a) Vi ser først på tilfellet der partiklene er spinnløse. Bestem midlere avstand mellom partiklene, definert som $\sqrt{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle}$, der x_1 er posisjonen til partikkel 1 og x_2 er posisjonen til partikkel 2, når

1. Partiklene er ulike.
2. Partiklene er identiske fermioner.
3. Partiklene er identiske bosoner.

Kommenter resultatet.

- b) Vi antar nå at de to partiklene begge er elektroner. Vi antar at spinnegenfunksjonene til det første og det andre elektronet er gitt ved henholdsvis $\chi_{\pm}(1)$ og $\chi_{\pm}(2)$, der $+$ betyr spinn opp og $-$ betyr spinn ned langs z -aksen. De fire mulige spinnskombinasjonene er altså $++$, $+-$, $-+$ og $--$.

Hvilke egenverdier for totalt spinn, S , og totalt spinn langs z -aksen, S_z , er mulige?

Hva er topartikkel spinnegenfunksjonene med disse forskjellige egenverdiene av S og S_z ?

- c) Hvordan avhenger den midlere avstanden mellom de to elektronene av spinntilstanden?

Oppgave 3:

a) Hva er en stasjonær tilstand?

Hvis A er en vilkårlig observabel, og H er Hamilton-operatoren, så er forventningsverdien av kommutatoren $[A, H]$ lik null i en stasjonær tilstand. Hvorfor?

b) La H være Hamilton-operatoren for elektronet i et hydrogenatom,

$$H = T + V = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} .$$

Her er $T = \vec{p}^2/(2m_e)$ kinetisk energi, og $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ er potensiell energi.

Beregn kommutatoren $[\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}, H]$.

Bruk resultatet til å bevise virialteoremet for forventningsverdiene til T og V i en stasjonær tilstand til hydrogenatomet:

$$2\langle T \rangle + \langle V \rangle = 0 .$$

Hvis den stasjonære tilstanden har energi E , hva er da $\langle T \rangle$ og $\langle V \rangle$?

Noen fysiske konstanter og formler

Lyshastigheten i vakuum:	$c = 299\,792\,458 \text{ m/s}$
Permeabiliteten i vakuum:	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$
Permittiviteten i vakuum:	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8,854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$
Den reduserte Plancks konstant:	$\hbar = h/(2\pi) = 1,055 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Elementærladningen:	$e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Finstrukturkonstanten:	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137,036$
Elektronmassen:	$m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg} = 0,511 \text{ MeV}/c^2$
Protonmassen:	$m_p = 1,6726 \times 10^{-27} \text{ kg} = 938,28 \text{ MeV}/c^2$

Kanoniske kommutasjonsrelasjoner:

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar , \quad [x, p_y] = [x, p_z] = \dots = [z, p_y] = 0 .$$

THE NORWEGIAN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
DEPARTMENT OF PHYSICS

Contact person:

Name: Jan Myrheim

Telephone: 73 59 36 53, mobile 90 07 51 72

Examination, course TFY4205 Quantum Mechanics II

Monday August 13, 2012

Time: 9.00–13.00

Grades made public: Monday August 27, 2012

Allowed to use: Calculator, mathematical and physical tables.

A table of physical constants can be found at the end of this problem set.

All subproblems are given the same weight in the grading.

Problem 1:

A particle of mass m moves in a one dimensional box potential as shown in Figure 1. The potential is periodic with period $L = a + b$, that is, $V(x) = V(x + L)$. We introduce a constant $\gamma > 0$ such that

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} .$$

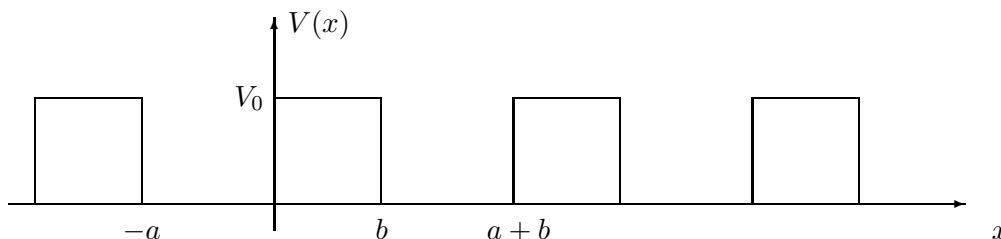


Figure 1: A one dimensional periodic box potential of period $L = a + b$.

a) We want to solve the time independent Schrödinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) .$$

For those values of x where the potential $V(x)$ is discontinuous we have to require that both the wave function $\psi(x)$ and its derivative $\psi'(x)$ are continuous. Why?

b) We try to find a solution of the form

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \cos(\alpha x) + B_1 \sin(\alpha x) & \text{for } -a \leq x \leq 0, \\ A_2 \cos(\beta x) + B_2 \sin(\beta x) & \text{for } 0 \leq x \leq b, \\ A_3 \cos(\alpha(x-a-b)) + B_3 \sin(\alpha(x-a-b)) & \text{for } b \leq x \leq a+b, \end{cases}$$

where $\alpha > 0, \beta > 0, A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$ are constants.

What is the relation between the energy E and the constants α and β ?

Why must $E > V_0$ for this to be a solution?

What will a similar solution look like for $0 < E < V_0$?

c) Show the following relation between the coefficients A_1, B_1 and A_3, B_3 :

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}$$

where

$$\begin{aligned} T_{11} &= \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \frac{\beta}{\alpha} \sin(\alpha a) \sin(\beta b), \\ T_{12} &= \sin(\alpha a) \cos(\beta b) + \frac{\alpha}{\beta} \cos(\alpha a) \sin(\beta b), \\ T_{21} &= -\sin(\alpha a) \cos(\beta b) - \frac{\beta}{\alpha} \cos(\alpha a) \sin(\beta b), \\ T_{22} &= \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \frac{\alpha}{\beta} \sin(\alpha a) \sin(\beta b). \end{aligned}$$

Note that the matrix

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

has determinant 1 (you need not carry out the computation here):

$$\det \mathbf{T} = T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} = 1.$$

Let λ_1 and λ_2 be the eigenvalues of the matrix $\mathbf{T}$. The characteristic polynomial is

$$\begin{vmatrix} T_{11} - \lambda & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (T_{11} + T_{22})\lambda + 1 = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2).$$

This shows that $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ and that

$$\lambda_1 + \lambda_2 = T_{11} + T_{22} = 2 \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right) \sin(\alpha a) \sin(\beta b).$$

If either $|\lambda_1| > 1$ or $|\lambda_2| > 1$, then $\psi(x)$ will grow exponentially in one or both of the limits $x \rightarrow \pm\infty$, which gives no meaning. Therefore we have to require that $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$, and this means that there must exist a $k > 0$ such that

$$\lambda_1 = e^{ikL}, \quad \lambda_2 = e^{-ikL}.$$

Then we have $\lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos(kL)$ and hence

$$\cos(kL) = \cos(\alpha a) \cos(\beta b) - \left(\frac{\beta}{2\alpha} + \frac{\alpha}{2\beta} \right) \sin(\alpha a) \sin(\beta b) . \quad (1)$$

We may regard this as an equation to be solved for k . The right hand side of the equation is a function of the energy eigenvalue E .

Remember that we derived equation (1) under the assumption that $E \geq V_0$. The corresponding equation for $0 \leq E \leq V_0$ looks like this:

$$\cos(kL) = \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + \left(\frac{\beta}{2\alpha} - \frac{\alpha}{2\beta} \right) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) . \quad (2)$$

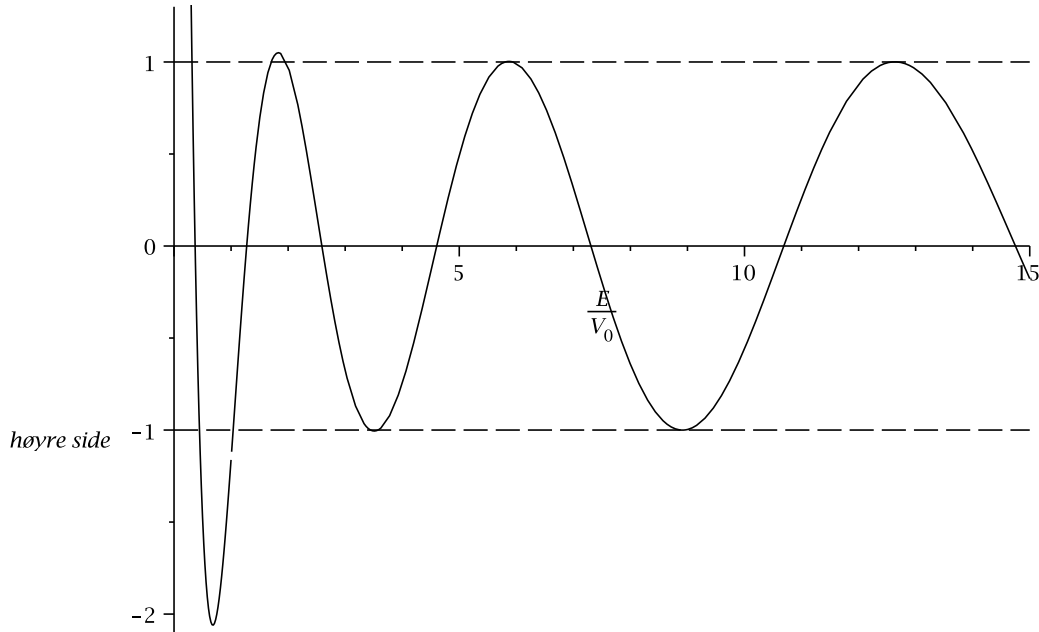


Figure 2: The right hand side of the equations (1) and (2) as a function of E/V_0 .

- d) Figure 2 shows the right hand side of equation (1) as a function of E/V_0 , for $E \geq V_0$, and the right hand side of equation (2) as a function of E/V_0 , for $0 \leq E \leq V_0$. The figure is plotted with $a = 3a_0$ and $b = 2,4a_0$ where a_0 is the natural length unit of the potential,

$$a_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}} .$$

Figure 3 shows two parts of Figure 2 with a much enlarged vertical axis.

The figures show that the energy spectrum has a band structure, with allowed and forbidden energy intervals. Explain how we can see this from the figures.

Read out from the figures which bands of allowed energy eigenvalues exist between $E = 0$ and $E \approx 15V_0$. Read out approximate numerical values for the lower and upper limit of each energy band.

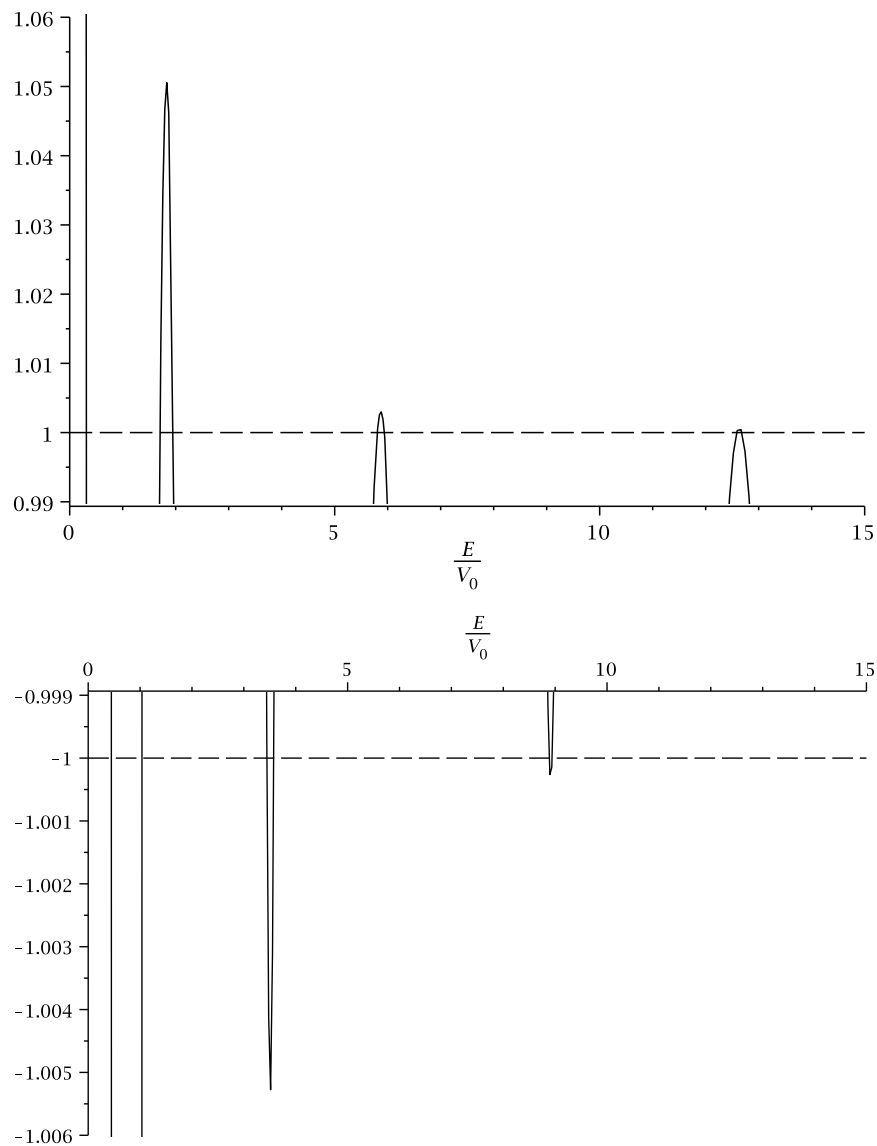


Figure 3: The right hand side of the equations (1) and (2) as a function of E/V_0 .

- e) The energy spectrum in a periodic three dimensional potential shows a similar band structure.

Explain briefly (but in reasonable completeness) how the band structure can explain that some materials become electrical conductors, while other materials become semi-conductors or isolators.

Problem 2:

We consider two particles in a one dimensional box of width a , where the potential is

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{when } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

We assume that one of the particles is in the ground state, described by the wave function

$$\psi_1(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) & \text{when } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

and the eigenenergy

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2.$$

The second particle is in the first excited state, described by the wave function

$$\psi_2(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) & \text{when } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

and the eigenenergy

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2.$$

In this problem you may need the following integrals:

$$\begin{aligned} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du \, u^2 \cos^2 u &= \frac{\pi^3}{24} - \frac{\pi}{4}, \\ \int_{-\pi}^{\pi} du \, u^2 \sin^2 u &= \frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2}, \\ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du \, u \cos u \sin(2u) &= \frac{8}{9}. \end{aligned}$$

a) We first consider the case when the particles are spinless. Find the mean distance between the particles, defined as $\sqrt{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle}$, where x_1 is the position of particle 1 and x_2 is the position of particle 2, when

1. The particles are different.
2. The particles are identical fermions.
3. The particles are identical bosons.

Comment on the result.

- b) We now assume that the two particles are both electrons. We assume that the spin eigenfunctions of the first and the second electron are given respectively by $\chi_{\pm}(1)$ and $\chi_{\pm}(2)$, where $+$ means spin up and $-$ means spin down along the z axis. Thus the four possible spin combinations are $++$, $+-$, $-+$, and $--$.

What are the possible eigenvalues for the total spin, S , and the total spin along the z axis, S_z ?

What are the twoparticle spin eigenfunctions with these different eigenvalues of S and S_z ?

- c) How does the mean distance between the two electrons depend on the spin state?

Problem 3:

- a) What is a stationary state?

If A is an arbitrary observable, and H is the Hamiltonian operator, then the expectation value of the commutator $[A, H]$ vanishes in a stationary state. Why?

- b) Let H be the Hamiltonian of the electron in a hydrogen atom,

$$H = T + V = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} .$$

Here $T = \vec{p}^2/(2m_e)$ is kinetic energy, and $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ is potential energy.

Compute the commutator $[\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}, H]$.

Use the result to prove the virial theorem for the expectation values of T and V in a stationary state of the hydrogen atom:

$$2\langle T \rangle + \langle V \rangle = 0 .$$

If the stationary state has energy E , what are then $\langle T \rangle$ and $\langle V \rangle$?

Some physical constants and formulas

The speed of light in vacuum:	$c = 299\,792\,458 \text{ m/s}$
The permeability of vacuum:	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$
The permittivity of vacuum:	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$
The reduced Planck's constant:	$\hbar = h/(2\pi) = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J s}$
The elementary charge:	$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
The fine structure constant:	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) = 1/137.036$
The electron mass:	$m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} = 0.511 \text{ MeV}/c^2$
The proton mass:	$m_p = 1.6726 \times 10^{-27} \text{ kg} = 938.28 \text{ MeV}/c^2$

Canonical commutation relations:

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar , \quad [x, p_y] = [x, p_z] = \cdots = [z, p_y] = 0 .$$