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

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

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

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

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?

<u>Hint:</u> 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

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

4) An electron is in the spin state

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

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: $h = 10\ \mathrm{cm}$, $R = 3\ \mathrm{cm}$, $m = 300\ \mathrm{g}$, $g = 9.8\ \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}^2}$, $T = 300\ \mathrm{K}$.
Also, we have $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}$ and $k_B = 1.4 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{m^2\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}}$.

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 prøvefunksjonen

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

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

b) Hvorfor er dette en god prøvefunksjon?

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?

<u>Hint:</u> For egenfunksjonene til H_0 har vi

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

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

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

4) Et elektron er i spinntilstanden

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

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?

<u>Hint:</u> 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 energiegenfunksjoner 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 energiegenverdien 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

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

<u>Hint</u>: 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 forenkle uttrykket ditt så mye du kan.

<u>Hint:</u> 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 $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ 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

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

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

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

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?

<u>Hint:</u> For eigenfunksjonane til H_0, har vi

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

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

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

4) Eit elektron er i spinntilstanden

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

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 varierast. 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 langsomt, vil ein partikkel i tilstanden $\psi_{n_x n_y n_z}$ ha kvantetala sine bevart, medan bølgjefunksjonen 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 frå 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 forenkle 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: $h = 10\ \mathrm{cm},\ R = 3\ \mathrm{cm},\ m = 300\ \mathrm{g},\ g = 9.8\ \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}^2},\ T = 300\ \mathrm{K}.$
Vi har dessutan $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}$ og $k_B = 1.4 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{m^2\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}}$.

Formulas:

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