응용 핵물리 I Lecture 7 Selected Problem (7-1, 7-3, 7-5, 7-12, 7-15)

7-1. 다음의 파동함수가 주어져 있다.

$\psi = Ae^{-ax}$, x > 0

$\psi = Ae^{+ax}$, x < 0

a) 이 함수를 규격화 하라. b) x = 1/a과 x = (1/a)+ dx 사이에서 입자를 발견할 확률은? c) x = 1/a과 x = 2/a 사이에서 입자를 발견할 확률은? d) x,p_x,x^2및 p_x^2의 기대치를 각각 구하라. e) 이 파동함수는 x=0에서 뾰족점(첨점,cusp)을 가진다. 이는 포텐셜에 관련하여 무엇을 가르키고 있는가?

Sol)

a) $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$ .... normalize

=> 구간을 나눠서 (x>0, x<0)

$$\int_{-\infty}^{0} A^2 e^{-2ax} dx + \int_{0}^{\infty} A^2 e^{-2ax} dx = 2A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax} dx$$

$$= \frac{2A^2}{-2a} e^{-2ax}|_0^{\infty} = \frac{A^2}{a} = 1$$

=> $A = \sqrt{a}$

$\therefore \psi = \sqrt{a} e^{-ax}$ (x>0)

$\psi = \sqrt{a} e^{+ax}$ (x<0)

b) $$\int_{\frac{1}{a}}^{\frac{1}{a}+dx} \psi^* \psi dx = A^2 \int_{\frac{1}{a}}^{\frac{1}{a}+dx} e^{-2ax} dx = \frac{a}{-2a} e^{-2ax}|_{1/a}^{1/a+dx}$$

$$= \frac{1}{2e^2}(1 - e^{-2adx}) \cong \frac{a}{e^2} dx$$ (talyor 전개)

c) $$\int_{\frac{1}{a}}^{\frac{2}{a}} \psi^* \psi dx = \frac{1}{2}(e^{-2} - e^{-4})$$ => b)번 문제에서 dx 대신에 1/a 代入

d) <x> = $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{0} axe^{2ax} dx + \int_{0}^{\infty} axe^{-2ax} dx = 0$

$$\langle P_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* [\frac{\hbar \partial}{i \partial x}] \psi dx = \int_{-\infty}^{0} \psi^* [\frac{\hbar \partial}{i \partial x}] \psi dx + \int_{0}^{\infty} \psi^* [\frac{\hbar \partial}{i \partial x}] \psi dx$$

$$= \int_{-\infty}^{0} (\sqrt{a}e^{ax} \times \frac{\hbar}{i} \times a\sqrt{a}e^{ax})dx - \int_{0}^{\infty} (\sqrt{a}e^{-ax} \times \frac{\hbar}{i} \times (a\sqrt{a}e^{ax}))dx$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int_{0}^{\infty} a^2 e^{-2ax}dx - \frac{\hbar}{i}\int_{0}^{\infty} a^2 e^{-2ax}dx = 0$$

마찬가지로 계산하면,

$< x^2 >= \frac{1}{2a^2}$, $< P_x^2 >= -\hbar^2 a^2$

e) x=0에서 cusp를 가지므로 $\frac{d\psi}{dx}$는 x=0에서 불연속적이고 $\frac{d^2\psi}{dx^2}$는 x=0에서 $\pm\infty$값을 갖는다. 그런데, time-independent equation에 따르면

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

여기서 ψ는 finite 이고 E는 constant이므로 결국 Potential V(x)가 $\pm\infty$ 값을 갖는다고 할 수 있다.

7-3. 함수 ψ_m,ψ_n은 Hamiltonian H의 고유함수(eigenfunction)들이고, 그 에너지는 각각 E_m, E_n이다. 어떤 조건 하에서 그 선형 결합인 $a\psi_m + b\psi_n$또한 H의 고유함수가 되겠는가?

Sol)

$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ ..... Hamiltonian operator

=> ψ_m, ψ_n 이 고유함수이므로 $H\psi_m = E\psi_m$ ....(*)

$H\psi_n = E\psi_n$

$a\psi_m + b\psi_n$ 역시 eigenfunction 이기 위해서는

$H(a\psi_m + b\psi_n) = E(a\psi_m + b\psi_n)$ 을 만족해야 한다.

$\therefore \quad a(H\psi_m - E\psi_m) + b(H\psi_n - E\psi_n) = 0$ ....(**)

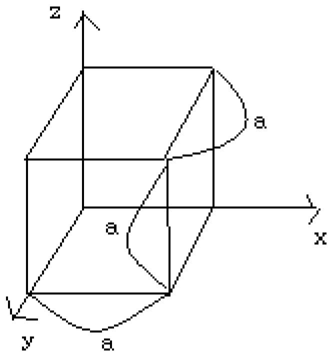
따라서, 어떤 a,b에서도 성립하기 위해서는

$H\psi_m - E\psi_m = 0$, $H\psi_n - E\psi_n = 0$

이식에 (*)식을 연결지어 계산하면 $E = E_m = E_n$ 이면 위 식을 만족한다.

7-5. 투과 불가능한 벽으로 이루어진 정육면체 상자 속에 질량 m의 입자가 갇혀 있다. 원점을 한 모서리에 설정하고, 대각선 반대 방향의 모서리는 x=a,y=a,z=a로 주어진다. 이 문제에 대해 Schrõdinger 방정식의 해는 $\psi = Asink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_z z$ 형태의 함수로 주어짐을 보이라. 상자내에서는 V=0으로 한다. a) 양자수 n_x, n_y, n_z 들로써 k_x, k_y, k_z에 대한 양자화 조건을 구하라. 그리고 총 에너지 E를 n_x, n_y, n_z들로써 표현하라. b) 파동함수를 규격화하여 A를 결정하라. c) p_x^2의 기대치(expectation value)를 결정하라. d) p_x^2은 단일값을 가진다고(sharp) 할 수 있는가?

Sol)



Schrõdinger Equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right)\psi = E\psi \quad (\because V = 0)$$

위 식에 $\psi = Asink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_z z$ 를 代入하면,

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) Asink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_z z = EAsink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_Z z$$

따라서 $\psi = Asink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_z z$ 형태의 함수가 되면,

$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$가 되어 schrõdinger 방정식을 만족한다.

...............(*)

a) $\psi = Asink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_z z$에서

상자의 경계면에서 0이 되어야 하므로 (양자화)

$\therefore \quad sink_x x = 0, \ sin_{k_y} y = 0, \ sink_z z = 0$

=> $ak_x = n_x\pi$

$k_x = \frac{n_x}{a}\pi$, 나머지 y,z에대해서도 마찬가지로 해주면,

따라서 이를 (*)식에 代入하면,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_X^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

b) $\int_0^a\int_0^a\int_0^a A sink_x x \cdot sink_y y \cdot sink_z z dxdydz$

$= A\int_0^a sink_x x\, dx \int_0^a sink_y y dy \int_0^a sink_z z dz$

$= \frac{A}{k_x k_y k_z}(1 - cosk_x a)(1 - cosk_y y)(1 - cosk_z z)$

$= \frac{a^3 A}{n_x n_y n_z \pi^3}(1 - cosn_x\pi)(1 - cosn_y\pi)(1 - cosn_z\pi)$

<= 양자화 조건에 따라

$= \frac{8a^3 A}{n_x n_y n_z \pi^3} = 1$

$\therefore\ A = \frac{n_x n_y n_z \pi^3}{8a^3}$ (단, $n_x = 1,3,5,......$ $n_y = 1,3,5,.......$ $n_z = 1,3,5,.......$)

c) $<p^2> = \int_0^a\int_0^a\int_0^a \psi^*(\frac{\hbar^2}{i^2})(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})\psi dxdydz$

그런데, a)에서 $E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

그리고 Schrõdinger Equation에서 $(\frac{\partial^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}) = -\frac{2m}{\hbar}E$

$\therefore\ (\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}) = -\frac{2m}{\hbar}(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2))$

따라서, $< p^2 >$은

$$< p^2 > = \hbar\int_0^a\int_0^a\int_0^a A^2 sin^2 k_x x \cdot sin^2 k_y y \cdot sin^2 k_z z \cdot \frac{\pi^2}{a^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)dxdydz$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2(n_x^2+n_y^2+n_z^2)}{a^2}A^2\int_0^a sin^2k_xxdx\int_0^a sin^2k_yydy\int_0^a sin^2k_zzdz$$

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{a^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\times\frac{n_x^2n_y^2n_z^2\pi^6}{64a^6}\times\frac{a^3}{8}$$

$< P^2 > = < P_x^2 > + < P_y^2 > + < P_z^2 >$ 이고, $< P_x^2 > = < P_u^2 > = < P_z^2 >$

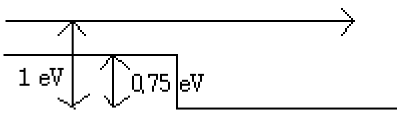
따라서 $\frac{1}{3} < P^2 > = < P_x^2 >$

d) c)에서 보듯이 n_x, n_y, n_z에 따라서 다양한 값을 가질 수 있다.

so P_x^2은 sharp 하지 않다.

7-12. 각각 에너지 E=1.00eV를 가지는 전자빔이 그림에서와 같이 포텐셜 계단을 왼쪽에서 접근하여 오른쪽으로 진행한다. 계단의 왼쪽에서는 모든 곳에서 포텐셜 에너지 V=0.75eV이며, 오른쪽에서는 모든 곳에서 영(zero)이다. 계단의 왼쪽에서의 입사 입자속(flux)에 대해 오른쪽에서의 입자속(flux)의 비(ratio)는? (즉 투과계수는 얼마인가?)

Sol)



투과계수 $T = -R = 1 - (\frac{1-\sqrt{1-V/E}}{1+\sqrt{1-V/E}})^2$

여기서 E= 1eV V=0.75eV를 代入하면,

$$T = 1 - (\frac{1-\sqrt{1-0.75}}{1+\sqrt{1-0.75}})^2 = 0.889$$

7-15. 1차원 조화진자(V=$ax^2/2$, 질량=m) 가 다음의 파동함수로 기술되는 상태에 존재한다. $\psi = Bxexp(-bx^2)$

a)ψ는 Schrōdinger 방정식을 만족함을 보이고, 이를 통해 b와 에너지E를 구하라.

b) 이는 기저(바닥) 상태인가, 첫째 여기(들뜸) 상태인가, 아니면 어떤 상태인가?

c) A를 에너지 E일때의 진자의 고전적인 진폭이라고 하면, x>A로 발견될 확률의 표현식을 구하라. A와 B에 관한 공식도 구하라.

Sol)

a) Schrõdinger equation에서

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi$$

여기서 $\psi=Bxexp(-bx^2)$를 代入하면,

=> $-\frac{\hbar^2}{2m}\times 2bBxexp(-bx^2)(2bx^2-3)+\frac{1}{2}ax^2Bxexp(-bx^2)$

$=EBxexp(-bx^2)$

$$Bxexp(-bx^2)\{-\frac{\hbar}{m}b(2bx^2-3)+\frac{1}{2}ax^2-E\}=0$$

$$Bxexp(-bx^2)\{x^2(\frac{1}{2}a-\frac{2\hbar b^2}{m})+\frac{3\hbar b}{m}-E\}=0$$

$$\frac{1}{2}a-\frac{2\hbar b^2}{m}=0 \quad , \quad \frac{3\hbar b}{m}-E=0$$

따라서 , $b=\frac{\sqrt{ma}}{2\hbar}, E=\frac{3\hbar^2 b}{m}$

b) $E_n=(n+1/2)\hbar w$ 에서 $(n+1/2)\hbar w=\frac{3}{2}\hbar w$

$\therefore$ n=1

즉 n=1 첫 번째 여기 상태이다.

c) $E=\frac{1}{2}aA^2=\frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{a}{m}}$ $\quad\therefore\quad A=(\frac{a\hbar^2}{ma})^{\frac{1}{4}}$

normalization 하면, $\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-ax^2}dx=\frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ 이므로

$$B^2\times\frac{1}{4b}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}=1$$

$\therefore\quad B^2=(\frac{16m^3a^3}{\pi^2\hbar^6})^{\frac{1}{4}}$ => $B=(\frac{16m^3a^3}{\pi^2\hbar^6})^{\frac{1}{8}}$