2009학년도 1학기 양자역학의 기초 숙제 #3 답안

1. 교재 p. 197, Exercise # 8.

5-8: The terms in the time-dependent Schrödinger equation, Equation (5.14), are each linear in Ψ; specifically,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = a_1 \frac{\partial\Psi_1(x,t)}{\partial t} + a_2 \frac{\partial\Psi_2(x,t)}{\partial t}$$
$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = a_1 \frac{\partial\Psi_1(x,t)}{\partial x} + a_2 \frac{\partial\Psi_2(x,t)}{\partial x}$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} = a_1 \frac{\partial^2\Psi_1(x,t)}{\partial^2 x} + a_2 \frac{\partial^2\Psi_2(x,t)}{\partial^2 x}$$
$$U\Psi = a_1 U\Psi_1(x,t) + a_2 U\Psi_2(x,t).$$

Using these expressions in Equation (5.14),

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= a_1\, i\hbar\frac{\partial\Psi_1(x,t)}{\partial t} + a_2\, i\hbar\frac{\partial\Psi_2(x,t)}{\partial t}\\
&= a_1\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1(x,t)}{\partial^2 x} + U\Psi_1(x,t)\right)\\
&\quad + a_2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2(x,t)}{\partial^2 x} + U\Psi_2(x,t)\right)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(a_1\frac{\partial^2\Psi_1(x,t)}{\partial^2 x} + a_2\frac{\partial^2\Psi_2(x,t)}{\partial^2 x}\right)\\
&\quad + U\left(a_1\Psi_1(x,t) + a_2\Psi(x,t)\right)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial^2 x} + U\Psi,
\end{aligned}$$

and so $\Psi(x,t)$ is a solution of Equation (5.14).

2. 교재 p. 198, Exercise # 15.

5-15: The necessary integrals are of the form

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_m \, dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{n \pi x}{L} \sin \frac{m \pi x}{L} \, dx$$

for integers n, m, with $n \neq m$ *and* $n \neq -m$. (A more general orthogonality relation would involve the integral of $\psi_n^* \psi_m$, but as the eigenfunctions in this problem are real, the distinction need not be made.)

To do the integrals directly, a convenient identity to use is

$$\sin\alpha \sin\beta = \frac{1}{2}\left[\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)\right],$$

as may be verified by expanding the cosines of the sum and difference of α and β. To show orthogongality, the stipulation $n \neq m$ means that $\alpha \neq \beta$ and $\alpha \neq -\beta$, and the integrals are of the form

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_m \, dx &= \frac{1}{L} \int_0^L \left[\cos \frac{(n-m)\pi x}{L} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{L}\right] dx \\
&= \frac{1}{L}\left[\frac{L}{(n-m)\pi} \sin \frac{(n-m)\pi x}{L} - \frac{L}{(n+m)\pi} \sin \frac{(n+m)\pi x}{L}\right]_0^L \\
&= 0,
\end{aligned}$$

where $\sin(n-m)\pi = \sin(n-m)\pi = \sin 0 = 0$ has been used.

3. 교재 p. 198, Exercise # 21.

5-21: The normalization constant, assuming A to be real, is given by

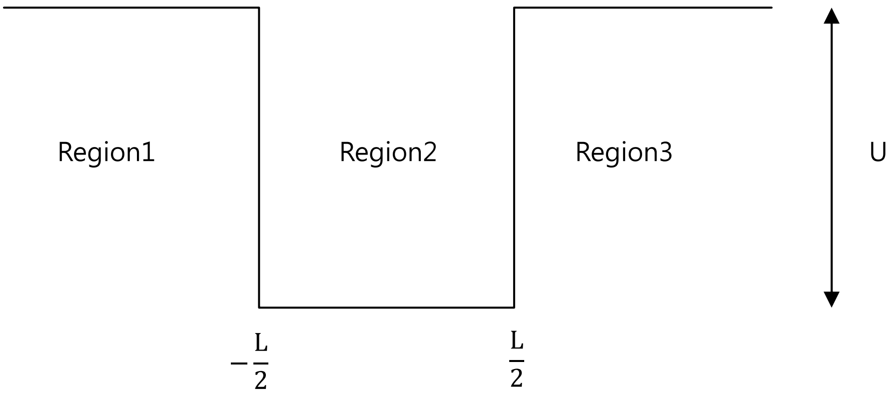
$$\begin{aligned}
&\int \psi^* \psi \, dV = 1 = \int \psi^* \psi \, dx \, dy \, dz \\
&= A^2 \left(\int_0^L \sin^2 \frac{n_x \pi x}{L} \, dx\right) \left(\int_0^L \sin^2 \frac{n_y \pi y}{L} \, dy\right) \left(\int_0^L \sin^2 \frac{n_z \pi z}{L} \, dz\right).
\end{aligned}$$

Each integral above is equal to $\frac{L}{2}$ (from calculations identical to Equation (5.43)). The result is

$$A^2 \left(\frac{L}{2}\right)^3 = 1 \quad \text{or} \quad A = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}.$$

4. (다른 문제의 두 배의 배점) 적절한 finite potential well을 가정하여 Figure 5.8과 같이 potential 장벽보다 낮은 에너지 준위가 3 개만 생기는 생기는 경우를 만들고, 실제 슈뢰딩거 방정식을 컴퓨터를 사용하여 풀어 Figure 5.8의 그림들을 컴퓨터를 이용하여 그리시오.

(이 문제의 경우 배점이 20점인 관계로 별도의 채점 기준을 적용합니다.)



대칭성을 이용하면 문제를 보다 간단히 풀 수 있습니다.

Region1 과 Region3의 potential 의 크기가 같기 때문에, even mode와 odd mode로 나누어서 생각해 보면 다음과 같이 modeling이 가능합니다.

Even mode (E1 & E3)

$$\psi_1(x) = Ae^{a(x+\frac{L}{2})} \qquad \left(x < -\frac{L}{2} \right)$$

$$\psi_2(x) = B\cos(bx) \qquad \left(-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \right)$$

$$\psi_3(x) = Ce^{-a(x-\frac{L}{2})} \qquad \left(\frac{L}{2} < x \right)$$

(where, $a = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$, $b = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$)

이 식에 경계조건을 대입하면,

$$A = B\cos\left(\frac{b}{2}L\right) = C$$ (파동함수의 연속 조건)

$$aA = bB\sin\left(\frac{b}{2}L\right) = aC$$ (파동함수의 미분이 연속 조건)

A=C임을 이용하고, 둘을 연립시켜 A와 B가 포함되지 않은 관계식을 얻을 수 있습니다.

(대칭성이 없는 일반적인 경우에는 많은 분들이 계산하신 4×4 행렬을 이 관계식을 얻기 위해 계산해야 합니다.)

얻어진 관계식은,

$$\frac{a}{b} = \tan\left(\frac{b}{2}L\right)$$

Odd mode (E2)

$$\psi_1(x) = Ae^{a(x+\frac{L}{2})} \qquad (x < -\frac{L}{2})$$

$$\psi_2(x) = B\sin(bx) \qquad (-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2})$$

$$\psi_3(x) = Ce^{-a(x-\frac{L}{2})} \qquad (\frac{L}{2} < x)$$

(where, $a = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$, $b = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$)

이 식에 경계조건을 대입하면,

$$A = -B\sin\left(\frac{b}{2}L\right) = -C$$ (파동함수의 연속 조건)

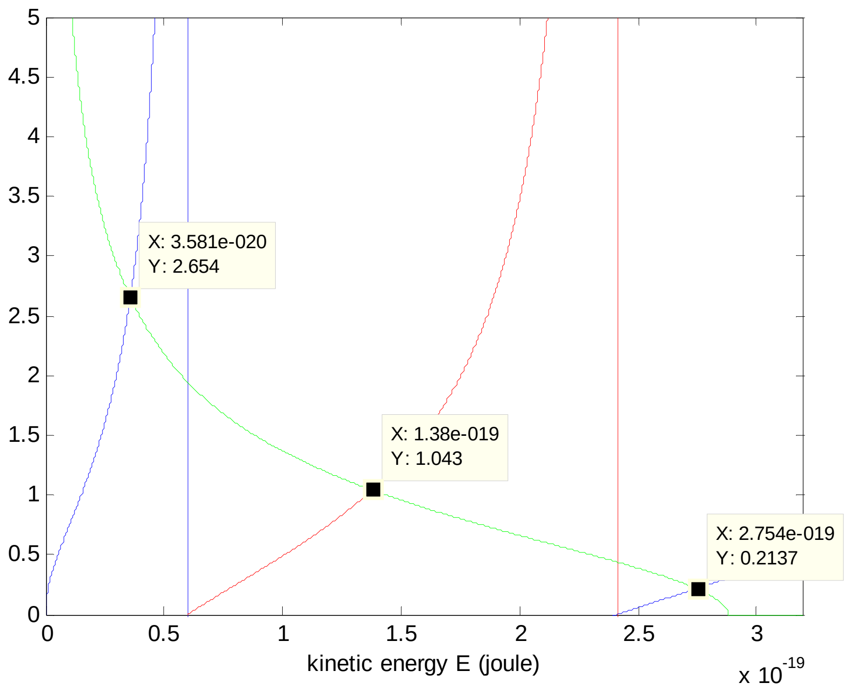
$$aA = bB\cos\left(\frac{b}{2}L\right) = -aC$$ (파동함수의 미분이 연속 조건)

A=-C임을 이용하고, 둘을 연립시켜 A와 B가 포함되지 않은 관계식을 얻을 수 있습니다.

얻어진 관계식은,

$$\frac{a}{b} = -\cot\left(\frac{b}{2}L\right)$$

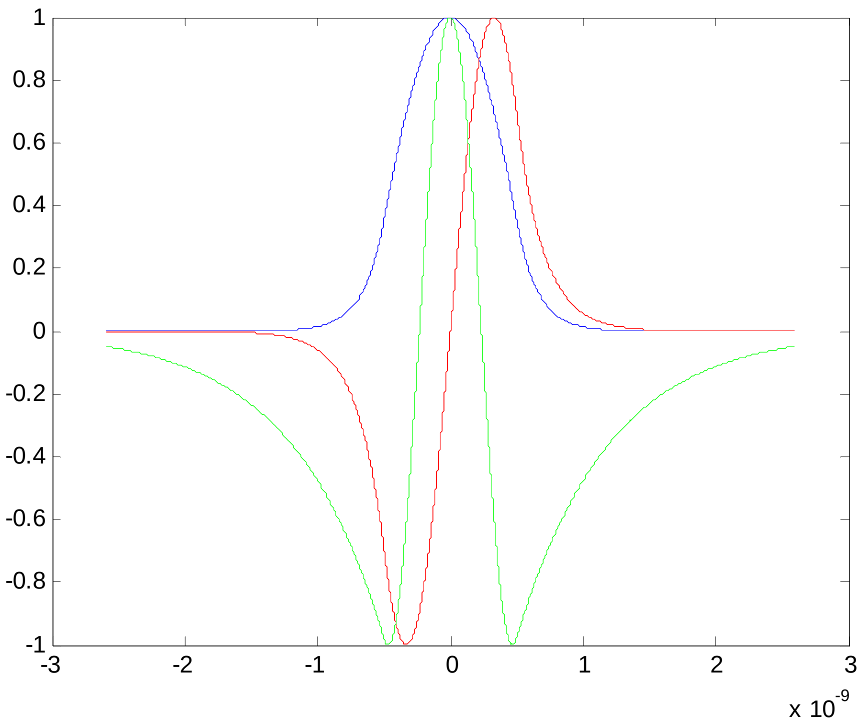
L은 modeling 하기 나름이므로 많은 분들이 사용하신 1nm로 놓고 관계식을 plot하면,



위 그림과 같이 $\tan\left(\frac{b}{2}L\right)$와 $= -\cot\left(\frac{b}{2}L\right)$식은 그림에서 푸른색 선과 붉은색 선에 각각 해당되며 이것은 potential이 바뀌어도 바뀌지 않습니다.(E와 L에만 관계) Potential의 변화하면 그림에서 녹색 선에 해당하는 $\frac{a}{b}$ 파라미터가 변화하는데, U값이 커질수록 점점 더 많은 mode가 생기는 방향으로 그래프가 이동하게 됩니다.(우측으로 이동) 이를 잘 조절하여 위 그림과 같이 3개의 해만 가지도록 설정한 뒤, 각각의 E 값을 읽어 a와 b를 계산하고 이를 그림으로 그리면 됩니다.

제가 잡은 파라미터의 경우 L=1nm U=1.8eV E1=0.2238eV E2=0.8625 E3=1.7212eV 로 구해졌습니다.

이제 그림으로 그리게 되면,



와 같이 그릴 수 있습니다. (제곱 함수도 비슷한 방식으로..)

채점 기준

(0점) 미제출

(5점) 문제 방향 제시 or 각 영역에서의 식

(10점) 관계식까지 찾은 경우 (det =0 이용 또는 위와 같은 풀이)

(15점) tan, cot 그래프와 함께 mode가 생기는 범위를 잘 서술하였으나 정량적인 E값의 계산이 없는 경우

(20점) 각 파동함수의 그림까지 그려낸 경우

- 관계식에서 바로 파동함수의 그림을 손으로 그린 경우 12점으로 처리