1. 교재 p. 294, Exercise # 2.

- Total Binding Energy

$$E = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} + \frac{2qe}{4\pi\varepsilon_0 (\frac{R}{2})} = -2.65eV$$

$$q = (E - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}) \times \frac{4\pi\varepsilon_0 R}{4e} = -0.299e$$

2. 보충자료 6의 마지막 페이지 Problem 13.1의 (a)

$$\hat{H}' = 10^{-3} E_1 \frac{x}{a}$$

First order correction to E_3 for a particle in a one-dimensional box

$$E_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)} = E_3^{(0)} + H'_{33}$$

Where,

$H'_{33} = \left\langle \varphi_3^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \varphi_3^{(0)} \right\rangle$, $\varphi_3^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{3\pi}{a})$ 를 대입하면,

$$H'_{33} = \frac{2}{a^2} 10^{-3} E_1 \int_0^a x \sin^2(\frac{3\pi}{a} x) dx = \frac{2}{a^2} 10^{-3} E_1 \frac{a^2}{4} = \frac{10^{-3} E_1}{2}$$

$E_3^{(0)} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ 임을 이용하여 대입하면,

$$E_3 = E_3^{(0)} + H'_{33} = E_3^{(0)} + \frac{10^{-3} E_1}{2} = E_1 (9 + \frac{1}{2000}) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} (9 + \frac{1}{2000})$$

3. 보충자료 11의 식 (2.103)부터 (2.115)까지를 옮겨 적으면서 중간의 유도 과정이 생략된 것이 있으면 보충해 넣으시오.

$$\psi = \sum_k c_k(t) u_k(x) e^{-iE_k t/\hbar}$$ time dependent 일 때의 일반적인 파동함수 기술 (2.103)

$$H_0 u_k(x) = E_k u_k(x)$$ time dependent한 perturbation이 없는 경우 (2.104)

Perturbation이 존재하는 경우의 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 기술된다.

$$(H_0 + H_I)\psi = i\hbar(\partial\psi/\partial t)$$

$$= i\hbar\sum_k (\dot{c}_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar} - i(E_k/\hbar)c_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar}) \qquad (2.105)$$

식을 정리하면,

$$H_0\psi + H_I\psi = i\hbar\sum_k(\dot{c}_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar}) + \sum_k E_k c_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar} = i\hbar\sum_k(\dot{c}_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar}) + H_0\psi$$

$$\therefore H_I\psi = \sum_k (H_I c_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar}) = i\hbar\sum_k(\dot{c}_k(t)u_k(x)e^{-iE_k t/\hbar}) \qquad (2.106)$$

양변에 $u_m^*(x)e^{iE_m t/\hbar}$ 를 곱하고 공간에 대해 적분하면

$$\sum_k \langle m|H_I|k\rangle e^{i(E_m-E_k)t/\hbar}c_k(t) = i\hbar\dot{c}_m(t)\sum_k\langle m|k\rangle e^{i(E_m-E_k)t/\hbar} = i\hbar\dot{c}_m(t)$$

$$\therefore \dot{c}_m(t) = (1/i\hbar)\sum_k\langle m|H_I|k\rangle e^{i(E_m-E_k)t/\hbar}c_k(t) \qquad (2.107)$$

초기에 (t=0) l state 하나에만 전자가 존재할 수 있었다라고 가정하면,

$$c_k(0) = \delta_{kl}. \qquad (2.108)$$

$\delta_{kl} = \langle k|l\rangle$을 107식에 대입하고 $\sum_k |k\rangle\langle k|l\rangle = |l\rangle$ 임을 이용하면,

$\dot{c}_m(t) = (1/i\hbar)\langle m|H_I|l\rangle e^{i(E_m-E_k)t/\hbar}$ 식을 얻게 되고 이 식의 양변을 적분함으로써

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\langle m|H_I(t')|l\rangle e^{i(E_m-E_l)t'/\hbar}. \qquad (2.109)$$

의 식을 얻는다.

그런데 이 결과는 근사적인 것으로 초기의 분포 (2.108)만을 가지고 구한 1차적인 해이다.

보다 정밀한 결과를 얻기 위해서는(또는 (2.109)의 값이 상쇄되는 경우)

(2.109)에서 구해진 해를 다시 한번 입력의 형태로 생각해서 나오는 2차적인 해까지 구하게 된다. 즉 2차적인 해는 앞에서의 $c_k(0)$ 대신 $c_k^{(1)}(t)$ 를 입력으로 놓고 다시 계산한다.

$$c_m^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_n \int_0^t dt''\langle m|H_I(t'')|n\rangle e^{i(E_m-E_n)t''/\hbar}c_n^{(1)}(t'')$$

$$= \frac{1}{(i\hbar)^2}\sum_n \int_0^t dt'' \int_0^{t''} dt'\langle m|H_I(t'')|n\rangle e^{i(E_m-E_n)t''/\hbar}\langle n|H_I(t')|l\rangle e^{i(E_n-E_l)t'/\hbar}, \tag{2.111}$$

따라서 2차 근사까지 마친 해는

$$c_m \simeq c_m^{(1)} + c_m^{(2)}, \tag{2.110}$$

와 같이 적게 된다.

원자가 photon을 흡수하거나 방출하는 현상을 모델링 하기 위한 perturbation은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$H_I(t) = H_I' e^{\mp i\omega t} \qquad \text{for} \quad \begin{Bmatrix}\text{absorption}\\ \text{emission}\end{Bmatrix}, \tag{2.112}$$

이것을 식 (2.109)에 대입하게 되면 time dependent 부분과 그렇지 않은 부분으로 나눌 수 있게 된다.

$$c_m^{(1)} = \frac{1}{i\hbar}\langle m|H_I'|l\rangle \int_0^t dt' e^{i(E_m-E_l\mp\hbar\omega)t'/\hbar}. \tag{2.113}$$

이 값을 제곱하면 기존에 한 state에 있던 전자가 다른 state로 전이하게 되는 transition probability를 의미하게 된다.

$$\left|c_m^{(1)}\right|^2 = -\frac{1}{\hbar^2}\left|\langle m|H_I'|l\rangle\right|^2 \left[\frac{\hbar}{i(E_m-E_l\mp\hbar w)}(e^{i(E_m-E_l\mp\hbar w)t/\hbar}-1)\right]^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle m|H_I'|l\rangle\right|^2 \left|e^{i(E_m-E_l\mp\hbar w)t/2\hbar}\right|^2 \left[\frac{2i\hbar}{(E_m-E_l\mp\hbar w)}\frac{(e^{i(E_m-E_l\mp\hbar w)t/2\hbar}-e^{-i(E_m-E_l\mp\hbar w)t/2\hbar})}{2i}\right]^2$$

$$= 4\pi\left|\langle m|H_I'|l\rangle\right|^2 \left[\frac{\sin^2((E_m-E_l\mp\hbar w)t/2\hbar)}{\pi(E_m-E_l\mp\hbar w)^2 t/2\hbar}\right] t/2\hbar$$

여기서 공식

$$\lim_{\alpha\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x). \tag{2.115}$$

를 사용, $\alpha = t/\hbar$, $x = (E_m - E_l \mp \hbar w)$ 으로 치환하여 생각하면 간단하다.

따라서 최종 결과는

$$\left|c_m^{(1)}\right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle m \,|\, H_I' \,|\, l\right\rangle\right|^2 \delta(E_m - E_l \mp \hbar w)t \tag{2.114}$$

으로 얻어진다.