Homework 1.

1. $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$  $\left(E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}\right)$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m_e \cdot E}} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 \times (1.62 \times 10^{-19} \times 4) \times (9.109 \times 10^{-31})}}$$

$$= 6.133\ \text{Å}$$

2. $\lambda = 600\,nm$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m_e}\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$$

$$= \frac{(6.626 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9.109 \times 10^{-31} \times (600 \times 10^{-9})^2} \cdot \frac{1eV}{1.602 \times 10^{-19}\,J}$$

$$= 4.179 \times 10^{-6}\,eV$$

4. $c = \lambda\nu$ ,  $E = \lambda h$

$$E = \frac{ch}{\lambda} = \frac{2.998 \times 10^8\,m \cdot 6.626 \times 10^{-27}\,g \cdot cm^2 \cdot 1eV \cdot s^2}{s \cdot s \cdot 600 \times 10^{-9}\,m \cdot 1.602 \times 10^{-2}\,cm^2 \cdot g}$$

$$= 2.607\,eV$$

전자는 질량을 가지므로 운동 에너지 사용,

photon 은 $E = \lambda h$ 식 사용.

Homework 1.

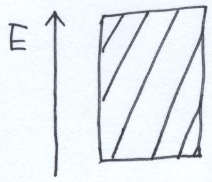
5. textbook 4-1.

① a free electron $V=0$, 1-D.

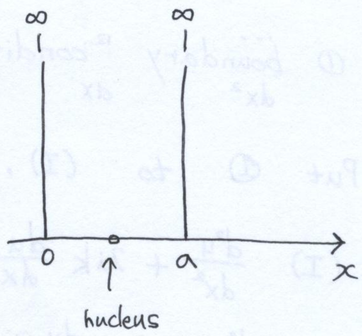
$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$\psi(x) = Ae^{i\alpha x} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{h}\cdot\frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda} = k$$

$\boxed{\therefore\ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$ ⇒ continuum E; can have any number.




② a stronly bound electron




$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$\psi = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} \quad \left(\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$$

– boundary condition

$x=0$, $\psi=0$ ⇒ $A+B=0$

$x=a$, $\psi=0$ ⇒ $A(e^{i\alpha a} - e^{-i\alpha a}) = 0$

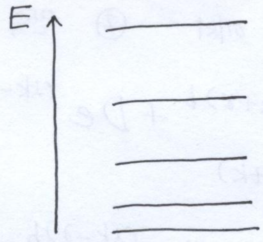
with the Euler equ.

$$\sin p = \frac{1}{2i}(e^{ip} - e^{-ip})$$

$$\Rightarrow A\cdot 2i\sin a\alpha = 0$$

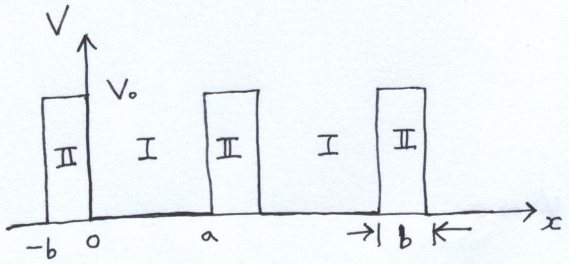
$$\therefore a\alpha = n\pi \quad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

$$\boxed{\therefore E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$




⇒ E level ; E quantization

③ an electron in a periodic potential.




$$\text{(I)} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \qquad \Rightarrow \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{(II)} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi = 0 \qquad \Rightarrow \gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$\psi(x) = \underbrace{u(x)}_{\text{periodic function}} e^{ikx} \qquad \text{(Bloch function)}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{du}{dx}\cdot 2ik - k^2 u\right) e^{ikx} \quad \cdots ①$$

Put ① to (I), (II)

$$\text{(I)} \quad \frac{d^2u}{dx^2} + 2ik\frac{du}{dx} - (k^2 - \alpha^2)u = 0$$

$$\text{(II)} \quad \frac{d^2u}{dx^2} + 2ik\frac{du}{dx} - (k^2 + \gamma^2)u = 0$$

$$\therefore \begin{cases} \text{(I)} \quad u = e^{-ikx}\left(Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}\right) \\ \text{(II)} \quad u = e^{-ikx}\left(Ce^{-\gamma x} + De^{\gamma x}\right) \end{cases}$$

- Boundary condition

$$② \begin{cases} \psi_{\mathrm{I}} = \psi_{\mathrm{II}} \\ \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{\mathrm{I}} = \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{\mathrm{II}} \end{cases}$$

(1) At $x = 0$, ② 만족.

$$A + B = C + D$$

$$A(i\alpha - ik) + B(-i\alpha - ik) = C(-\gamma - ik) + D(\gamma - ik)$$

(2) For periodicity, at $x = a$, $x = -b$ 에서 ② 만족.

$$Ae^{(i\alpha - ik)a} + Be^{(-i\alpha - ik)a} = Ce^{(ik+\gamma)b} + De^{(ik-\gamma)b}$$

$$Ai(\alpha - k)e^{ia(\alpha - k)} - Bi(\alpha + k)e^{-ia(\alpha + k)}$$

$$= -C(\gamma + ik)e^{(ik+\gamma)b} + D(\gamma - ik)e^{(ik-\gamma)b}$$

위 계산 결과로 부터 Schrödinger Equ. 의 해에 관한 정보를 담은 식을

도출할 수 있다.

$$\frac{\gamma^2-\alpha^2}{2\alpha\gamma}\sinh(\gamma b)\sin(\alpha a)+\cosh(\gamma b)\cos(\alpha a)=\cos k(a+b)$$

가정 small $b$, large $V_o$, $V_o b$ = finite.

$$V_o \gg E,\ \gamma^2 \fallingdotseq \frac{2mV_o}{\hbar^2},\quad \gamma b=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sqrt{V_o b\cdot b}\quad b\sim 0$$

$$\cosh(\gamma b)\approx 1,\quad \sinh(\gamma b)\approx \gamma b$$

$$\gamma^2 \gg \alpha^2,\quad a\gg b$$

$$\frac{\gamma^2}{2\alpha\gamma}\cdot\gamma b\cdot\sin\alpha a+\cos\alpha a=\cos ka$$

$$\frac{m}{\alpha\hbar^2}V_o b\sin\alpha a+\cos\alpha a=\cos k\alpha$$

$$P\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a=\cos kd\qquad \left(P=\frac{maV_o b}{\hbar^2}\right)$$

우변의 $\cos kd$ 가 $-1\leq\cos k\alpha\leq 1$ 이어서 특정 $\alpha a$ 값만

허용된다. 가정에 의해 $\alpha^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\Rightarrow E=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$ 이므로

E 역시 $\alpha$ 값에 의해 특정 영역에서만 그 값을 갖는다.

이렇게 전자가 E를 갖는게 불가능한 지역을 Energy band gap 이라

하고 전자의 E 영역을 나타낸 것을 Energy band 라고 한다.

⇒ E is forbidden at specific regions.

(Energy band gap)

⇒ Energy band model. (textbook p. 32, 33 참조)

* 이렇게 서로 다른 Energy band scheme 을 갖는 이유는

전자가 원자와의 상호 거리, interaction 에 따라 느끼는

potential energy 가 달라지기 때문이다.

Homework 1.

6. Textbook 4-2.

$$\psi\psi^* = 4A^2 \sin^2 \alpha x = 4A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

normalization 하면

$$\int_0^a \psi\psi^* \, dx = \int_0^a 4A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

$$\therefore \; A = \sqrt{\frac{1}{2a}}$$

$* \; n \uparrow$

1) 파장 다르나, 진폭 동일

2) $E_k \uparrow$ $\left(\because E_k = \dfrac{h^2}{2m\lambda^2}\right)$

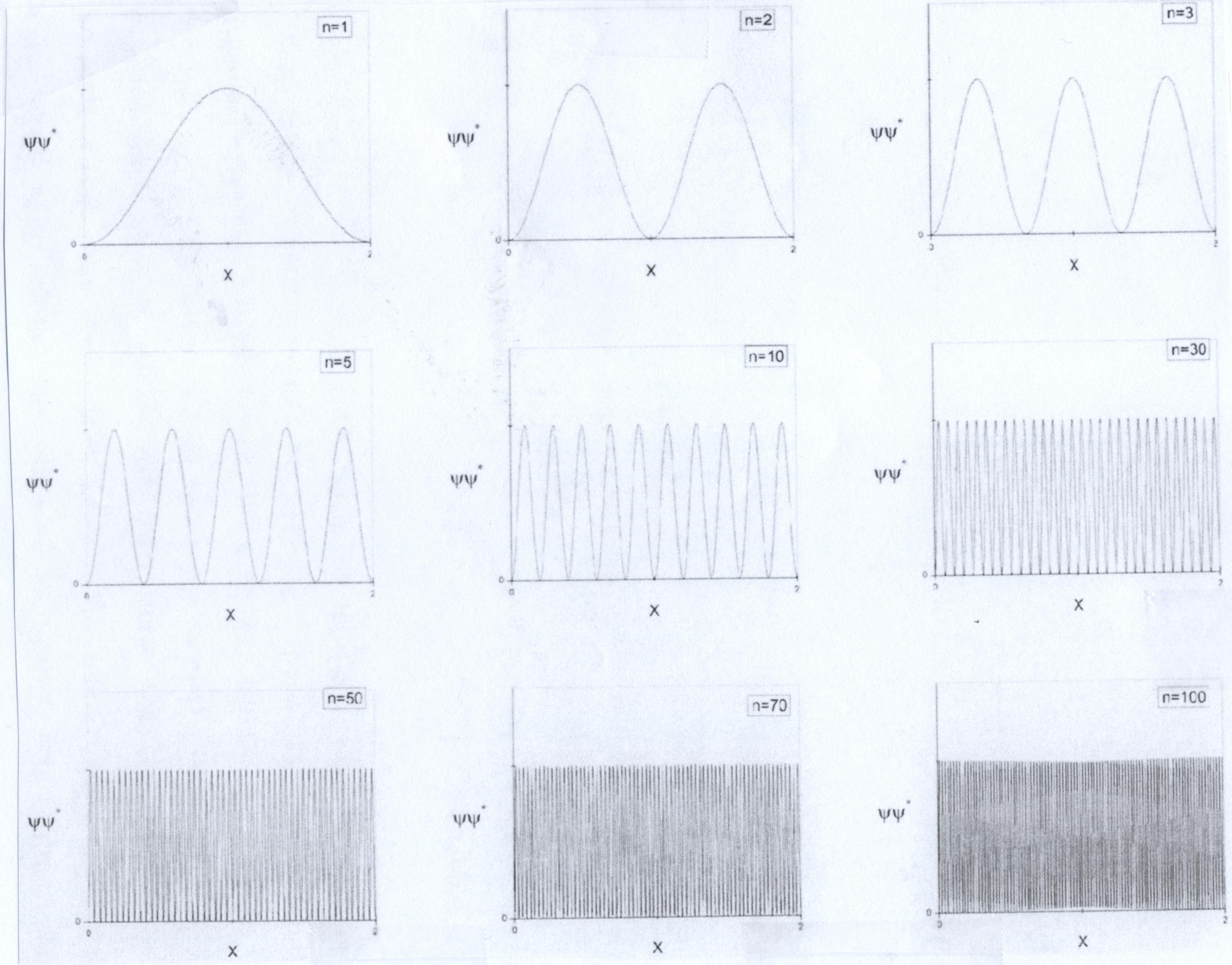
3) $\psi\psi^*$의 값이 주어진 위치 영역에서 보다 균일해진다.

따라서 n이 굉장히 클 때는 전자가 평균적으로 모든 위치에서 동일한 시간을 소비하는 결과가 된다. 즉, 큰 n 값에서는 양자역학적 결과가 classic한 결과와 동일하게 된다.

(대응원리)

(그래프 ^^)

우수 답안인 김진명 씨의 답안을 복사하여 올립니다. 감사드립니다.



Homework 1.

7. Heisenberg 의 Indeterminancy principle

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

는 전자의 위치와 운동량을 동시에 정확히 명시할 수 없다는 원리이다.

전자를 많은 harmonic wave 의 중첩으로 나타낼 때 $\Delta k \approx 0$, $\Delta w \approx 0$ 과 같이 k와 w 의 변화가 작은 경우 "long" wave packet 이 형성되어 정확한 λ 와 P 값을 알 수 있으나 (파동성), $w + n\Delta w$ (n=1,2, 과 같이 k와 w 에 큰 변화를 주어 많은 wave function 을 중첩 시키는 경우 "short" wave packet 이 형성되며 전자의 위치가 정확해 파장 λ 와 p 를 정확히 결정하기 어려워진다. (입자성)

(text book p 11. fig. 2.3. 참조)

측정의 경우, 정확한 위치 측정을 위해 측정파의 λ 를 감소시켜 $\Delta x$ 를 줄이면, ($\Delta x = \lambda$ 로 가정해도 reasonable 하다.) 측정파와 전자간의 상호작용이 커져 운동량이 변화하게 되고 이때 $\Delta p = \frac{h}{\lambda}$ 로 대략 가정한다. 반대의 경우 측정파 λ 를 크게 하여 전자의 운동량 변화 $\Delta p$ 를 감소시키면 $\Delta x$ 가 커지게 된다.

이렇듯 양자 역학에서는 고전 역학과 달리 위치와 운동량이 각각 명시되지 못하고, 상보 로 측정된다.

Homework 1.

8. (a) $\psi = e^{i(kx-wt)}$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik e^{i(kx-wt)} = ik\psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 e^{i(kx-wt)} = -k^2\psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -iw e^{i(kx-wt)} = -iw\psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -w^2 e^{i(kx-wt)} = -w^2\psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + ia(ik\psi) = -bw^2\psi$$

$$\underline{k^2 + ak = bw^2} \rightarrow w = \sqrt{\frac{k^2+ak}{b}}$$

(b) $V_p = \frac{w}{k}$ ; $V_p = \sqrt{\frac{k^2+ak}{bk^2}} = \sqrt{\frac{1}{b} + \frac{a}{bk}} = \frac{2w}{-a+\sqrt{a^2+4bw^2}}$

(c) $V_g = \frac{dw}{dk}$ ; $V_g = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{b}{k^2+ak}} \cdot \frac{2k+a}{b} = \frac{2bw}{\sqrt{a^2+4bw^2}}$

(d) $$\frac{V_g}{V_p} = \frac{2k+a}{2b}\sqrt{\frac{b}{k^2+ak}} \cdot \sqrt{\frac{bk^2}{k^2+ak}}$$

$$= \frac{2k+a}{2\cancel{b}} \cdot \frac{\cancel{b}k}{k^2+ak} = \frac{2k+a}{2k+2a}$$

(i) $k=0$ ; $\frac{V_g}{V_p} = \frac{1}{2}$

(ii) $k \rightarrow \infty$ ; $\lim_{k\rightarrow\infty} \frac{V_g}{V_p} = 1$