2016 / 11 / 21 (월) (1)

Particle in a box 문제.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi(x) = E\,\psi(x)$$ 을 풀어보자.

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

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = (V-E)\frac{2m}{\hbar^2}\psi(x)$$ 로 간단히 쓸 수 있다.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{L}{2} \le x \le \frac{L}{2} \quad (\text{II region}) \\ \infty & \frac{L}{2} < x,\ x < -\frac{L}{2} \quad (\text{I, III}) \text{ region.} \end{cases}$$

먼저 III 영역에서

$$\psi_{\text{I,III}}(x) = A e^{-kx} + B e^{kx} \quad \text{where} \quad k = \left(\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

의 해 형태를 갖는다.

~~[illegible]~~ 후자와 같은 항은 I, III 공간에서 존재할 수 없다.

물리적으로 파동함수가

그러므로 I, III 영역에서는 $B=0$.

$$\psi_{\text{I,III}}(x) = A e^{-kx} \qquad k = \left(\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Ⅱ 에서는 $V=0$ 이다.

$$\psi_{\text{II}}(x) = A e^{-\sqrt{\frac{-E2m}{\hbar^2}}x} + B e^{\sqrt{\frac{-E2m}{\hbar^2}}x}$$

$$= A e^{-i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x} + B e^{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x}$$

$$= A e^{-ikx} + B e^{ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

경계 조건에 의해 $\psi_{\text{II}}\left(-\frac{L}{2}\right) = 0$

$$\psi_{\text{II}}\left(\frac{L}{2}\right) = 0.$$

$$A e^{+ik\frac{L}{2}} + B e^{-ik\frac{L}{2}} = 0$$

$$A e^{-ik\frac{L}{2}} + B e^{ik\frac{L}{2}} = 0.$$

$$\begin{pmatrix} e^{ik\frac{L}{2}} & e^{-ik\frac{L}{2}} \\ e^{-ik\frac{L}{2}} & e^{ik\frac{L}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0.$$

A, B 가 해를 가지기 위해서 $e^{ikL} - e^{-ikL} = 0.$

$$\Rightarrow 2i\sin kL = 0.$$

$kL = \pi n$ $\quad$ n: 정수.

$\therefore k = \dfrac{\pi n}{L}$ //

즉 $\dfrac{\pi n}{L} = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

$\Rightarrow E_n = \dfrac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{L^2 2m}$.

$$A e^{-i\frac{\pi n}{L}\frac{L}{2}} + B e^{i\frac{\pi n}{L}\frac{L}{2}} = 0$$

$$A + B e^{i\pi n} = 0$$

$A + B(-1)^n = 0$.

$A = -B(-1)^n$

n : odd $\quad A = B \quad \psi_{II}(x) = A 2 \cos \dfrac{\pi n x}{L} \Rightarrow \sqrt{\dfrac{2}{L}} \cos \dfrac{\pi n x}{L}$

n : even $\quad A = -B \quad \psi_{II}(x) = 2Ai \sin \dfrac{\pi n x}{L} \Rightarrow \sqrt{\dfrac{2}{L}} \sin \dfrac{\pi n x}{L}$.