6장 일차원에서의 양자역학

파동함수(wave function), 양자역학(quantum mechanics)
파동역학의 기본적인 성질과 간단한 계에 대한 적용

6.1 Max Born의 해석

양자역학의 과제

- **파동함수로부터 입자에 대한 정보를 어떻게 뽑아내는 문제**
- **주어진 계에 대한 파동함수를 어떻게 구하는 문제**

Born의 Ψ 해석

파동함수($\Psi(x,t)$) ; 입자에 대한 모든 정보를 포함. 운동량, 에너지, 존재확률 등

- $P(x)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx$ **: 입자가 지점 x에 있는 미소구간 dx에 있을 확률**
- $P(x) = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$**: 물질파의 세기, Ψ와 그 복소공액의 곱, 확률밀도(probability density)**
- $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$ **; 파동함수의 규격화**

$$P_{ab} = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx \quad ; \ a \le x \le b\text{에서 입자를 발견할 확률}$$

- **Ψ는 연속 함수, 단일 함수, 도함수도 연속(Ψ는 부드러워야 한다.)이어야 한다.**

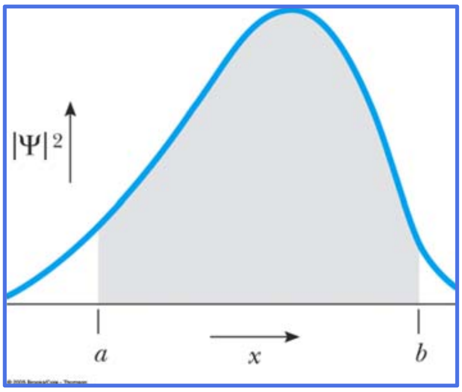
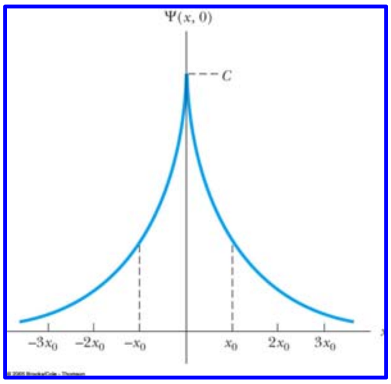


그림 6.1 입자가 구간 $a \le x \le b$에 있을 확률은 a부터 b까지 확률밀도 함수 $|\Psi(x,t)|^2$ 곡선 아래의 면적과 같다.

예제 6.1 파동 함수의 규격화

$\Psi(x,0) = C\exp(-|x|/x_0)$. 함수의 모양을 그리고 규격화 되도록 C를 x_0로 나타내어라.



$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2|x|/x_0} dx$$

$$1 = 2C^2 \int_0^{\infty} e^{-2x/x_0} dx = 2C^2\left(\frac{x_0}{2}\right) = C^2 x_0$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{x_0}}$$

예제 6.2 확률 계산

입자가 $-x_0 \le x \le x_0$에서 발견될 확률

$$P = \int_{-x_0}^{x_0} |\Psi(x,0)|^2 dx = 2\int_0^{x_0} |\Psi(x,0)|^2 dx$$

$$P = 2C^2 \int_0^{x_0} e^{-2x/x_0} dx = 2C^2(x_0/2)(1-e^{-2})$$

$C^2 = 1/x_0$ 이므로

$$P = 1 - e^{-2} = 0.8647$$

x_0에 상관없이 86.5%

6.2 자유입자의 파동방정식

자유입자 : 힘을 받지 않는 입자. 자유공간(free space)

$$k = p/\hbar \quad \text{and} \quad \omega = E/\hbar \qquad (6.4)$$

비 상대론적 입자의 ω 와 k의 관계

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \qquad (6.5)$$

자유입자의 평면파

$$\begin{aligned}\Psi_k(x,t) &= Ae^{i(kx-\omega t)} \qquad (6.6)\\ &= A\{\cos(kx-\omega t) + i\sin(kx-\omega t)\}\end{aligned}$$

- $p = \hbar k,\ \ E = \hbar\omega$; 운동량과 에너지
- 진행파
- $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t) = A^2$; 위치의 불확정도는 무한대, $\Delta x = \infty$

  🍌 $\rightarrow$ $\Delta p = 0$이기 때문
- 이 평면파는 다음의 방정식을 만족한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\Psi = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar(-i\omega)\Psi = \hbar\omega\Psi$$

파동 묶음(wave packet)

- 입자의 국재화(localization) : x_0를 중심으로 Δx만큼의 범위에 존재
- 서로 다른 파수를 가진 평면파들의 중첩

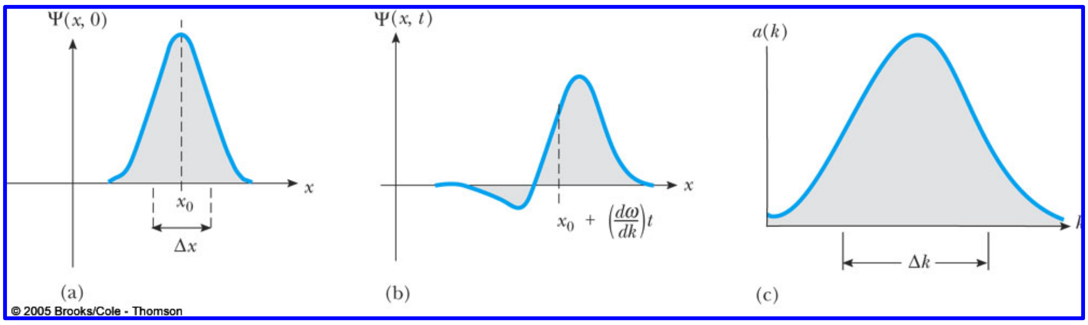


그림 6.3 (a) 평면파들의 중첩에 의해 형성된 파동 묶음 $\Psi(x,0)$ (b) 시간 t후의 같은 파동 묶음의 모양(실수부) (c) 중첩을 하는 각각의 평면파 진폭을 나타내는 진폭 분포 함수 a(k)

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k)e^{ikx}dk \qquad (6.7)$$

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k)e^{i(kx-\omega(k)t)}dk \qquad (6.8)$$

- Fourier 적분 : $\Psi(x,0)$로부터 파수분포 $a(k)$를 구한다.
- 분산 : 파수에따라 위상속도가 다르므로, 파동묶음은 전파되어 감에 따라 그 모양이 변한다.

  $\omega = \omega(k)$: dispersion relation(분산관계)
- 군속도 : 파동묶음의 속도

$v_p = \dfrac{\omega}{k}$: 위상속도

$v_g = \dfrac{d\omega}{dk}$: 군속도

、$\Psi(x,0)$의 분포(Δx)가 좁을수록 $a(k)$의 범위(Δk)가 넓어진다.

$\Delta x \Delta k \approx 1$

$\Delta x \Delta p \sim \hbar$: 불확정성 원리 (6.9)

예제 6.3 파동 묶음의 구성

함수 $a(k) = (C\alpha/\sqrt{\pi})\exp(-\alpha^2 k^2)$일 때 파동함수 $\Psi(x,0)$를 구하라. 이 경우 $\Delta x \Delta k$는 얼마가 되겠는가?

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k)e^{ikx}dk = \frac{C\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{(ikx-\alpha^2k^2)}dk$$

$$ikx - \alpha^2 k^2 = -\left(\alpha k - \frac{ix}{2\alpha}\right)^2 - \frac{x^2}{4\alpha^2}$$

우변의 둘째 항은 k에 대해 상수, $z = \alpha k - ix/2\alpha$로 치환하면

$$\Psi(x,0) = \frac{C}{\sqrt{\pi}}e^{-x^2/4\alpha^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}dz$$

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}dz = \sqrt{\pi}$ 이므로

$\Psi(x,0) = Ce^{-x^2/4\alpha^2} = Ce^{-(x/2\alpha)^2}$: Gaussian function

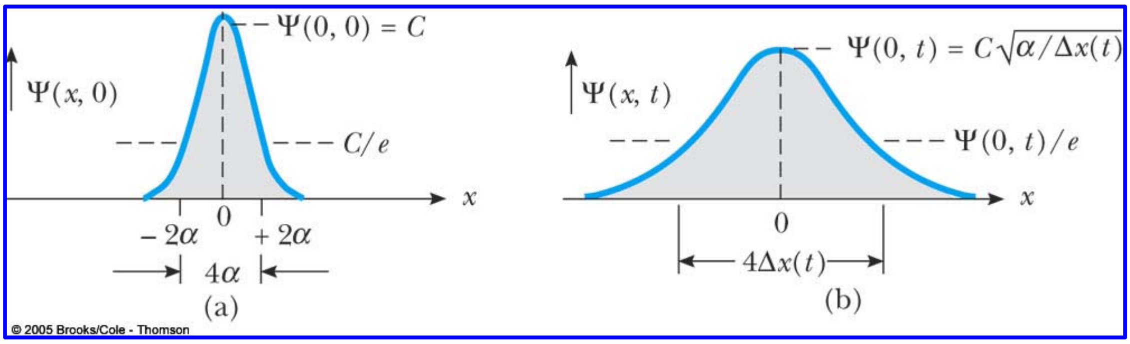


그림 6.4 (a) 가우스 파동함수 $\Psi(x,0) = C\exp\{-(x/2\alpha)^2\}$, $\Delta x = \alpha$ (b) 시간 t에서의 파동함수.

$\Delta x = 4\alpha$ and $\Delta k = \dfrac{1}{2\alpha}$

$\Delta x \Delta k = 2$

파속은 시간이 경과함에 따라 분산되어 점점 넓어진다.(문제 4)

$$\Delta x(t) = \sqrt{[\Delta x(0)]^2 + \left[\frac{\hbar t}{2m\Delta x(0)}\right]^2}$$

예제 6.4 물질파의 분산

원자 내(0.10nm)의 전자가 원자 크기(0.10nm)에 국소화되어 있다. 이 국소화가 분산에 의해 파괴되는 데 걸리는 시간은 얼마인가? 질량 1g인 공깃돌이 처음에 0.10mm에 국소화된 경우에 대하여 계산하여라.

풀이

물질파의 분산 식은

$$\Delta x(t) = \sqrt{[\Delta x(0)]^2 + \left[\frac{\hbar t}{2m\Delta x(0)}\right]^2}$$

$\hbar t/2m = \sqrt{99}\,[\Delta x(0)]^2$ 이면 $\Delta x(t) = 10\Delta x(0)$로 분산되는 시간을 계산한다.

$$t = \sqrt{99}\left(\frac{(2)(9.11\times10^{-31}\mathrm{kg})}{1.055\times10^{-34}\mathrm{J\cdot s}}\right)(1.00\times10^{-10}\mathrm{m})^2 = 1.7\times10^{-15}\mathrm{s}$$

질량 1.0g인 공깃돌이 0.10mm에 국소화된 경우 $\Delta x(t) = 10\Delta x(0)$로 분산되는 시간

$$t = \sqrt{99}\left(\frac{(2)(10^{-3}\mathrm{kg})}{1.055\times10^{-34}\mathrm{J\cdot s}}\right)(10^{-4}\mathrm{m})^2 = 1.9\times10^{24}\mathrm{s}$$

$$\fallingdotseq 6.0\times10^{16}\mathrm{year}$$

분산시간은 우주나이의 천만 배! 영원히 국소화 되어 있다.

6.3 힘의 영향을 받는 파동함수

Shrödinger 방정식

힘이 작용하는 입자의 파동함수는 Shrödinger 방정식을 만족한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad (6.10)$$

변수 분리가 가능한 Shrödinger 방정식의 해를 구한다.

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) \qquad (6.11)$$

식 6.11을 식 6.10에 대입하고 $\psi(x)\phi(t)$를 나누면

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + U(x) = i\hbar\frac{\phi'(t)}{\phi(t)}$$

좌변은 x만의 함수이고 우변은 t만의 함수이다. 항상 성립하기 위해서는 양변이 상수이어야 한다. 상수를 E로 둔다.

$$i\hbar\frac{d\phi}{dt} = E\phi(t) \qquad (6.12)$$

$$\phi(t) = e^{-i\omega t},\ \ \omega = \frac{E}{\hbar}$$

시간 의존성은 자유입자와 같다. $\psi(x)$에 대한 방정식은

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad (6.13)$$

🍌 → 시간무관 Schrödinger 방정식

얌전한 해(well behaved solution)

1. $\psi(x)$는 Scrödinger 방정식을 만족해야한다.
2. $\psi(x)$는 연속이어야 한다.
3. $\psi'(x)$는 연속이어야 한다.
4. $\psi(x)$가 정규화 될 수 있도록 $x\rightarrow\pm\infty$일때 $\psi(x)\ \rightarrow\ 0$ 이어야 한다.

정상상태의 확률은 $\psi(x)$로부터 구해진다.

$$|e^{-i\omega t}|^2 = e^{+i\omega t}e^{-i\omega t} = e^0 = 1$$

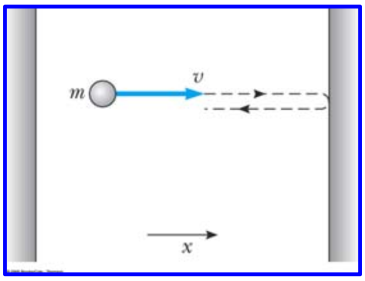
$$|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2 \qquad (6.14)$$

확률은 시간에 무관하다.

정상상태의 경우 모든 확률은 정지해 있으며 시간에 무관한 파동 함수 $\psi(x)$로부터 계산해 낼 수 있다.

6.4 상자 안의 입자

상자 안에 구속된 입자



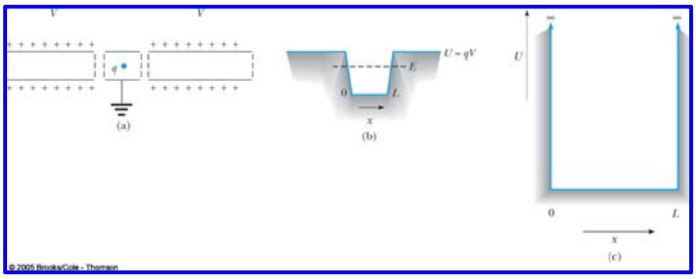


그림 6.5 질량 m과 속력 v를 가진 입자가 투과할 수 없는 두 벽 사이에서 탄성충돌로 튕겨 나오는 모습.
그림 6.6 (a) 내부의 원통은 접지되어 있고 바깥의 것들은 고전압 V로 유지되어 있다. 대전 입자 q는 원통 내에서 자유롭게 움직이지만, 그 끝의 틈에서는 전기력을 받는다. (b) 이 입자에서 본 전기 퍼텐셜 에너지. (c) 이상적인 무한 직사각각 우물형 퍼텐셜

$$0 < x < L \quad ; \quad U = 0$$
$$x \leqq 0,\ x \geqq L \ ; \quad U = \infty$$

상자 밖에서는 입자를 발견할 확률은 '0'이다.

상자 안

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi(x) \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \quad 0 < x < L \quad (6.15)$$

안쪽의 파동은 $x=0,\ x=L$에서 영이 되어야 하므로

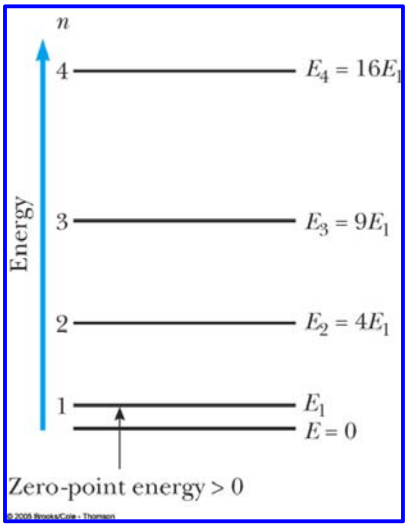
$\psi(0) = B = 0$; x=0에서 연속 (6.16)

$\psi(L) = A\sin kL = 0$; x=L에서 연속

$kL = n\pi$

운동량의 양자화 ; $p_n = \hbar k_n = n\dfrac{\hbar\pi}{L}$

$$L = n\frac{\lambda}{2}$$



즉 상자 안에 반 파장의 정수 배가 채워진다. → 정상파 조건

에너지의 양자화

$$E_n = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \qquad n = 1, 2, \cdots \qquad (6.17)$$

$E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$: 바닥상태(ground state)

$E_n = n^2E_1 \quad n = 2,\ 3,\ 4,\ \cdots$: 들뜬상태(excited state)

영점에너지(zero-point energy)

- $E = 0$은 허용되지 않는다.
- 입자는 결코 정지해 있을 수 없다.

예제 6.5 거시적인 물체의 에너지 양자화

$L = 1.00\text{cm}$인 벽사이에 $m = 1.00\text{mg}$인 물체가 구속되어 있다.
(a) 이 물체가 가질 수 있는 최소 속력을 구하라. (b) v=3.00cm/s 일 때, 대응하는 n 값은 얼마인가?

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

$$E_1 = \frac{(6.626\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s})^2}{8.00\times10^{-10}\text{kg}\cdot\text{m}^2} = 5.49\times10^{-58}\text{J}$$

$E_1 = mv_1^2/2$ 이므로

$$v_1 = \sqrt{2(5.49\times10^{-58}\text{J})/(1.00\times10^{-6}\text{kg})} = 3.31\times10^{-26}\text{m/s}$$

v=3.00 cm/s 이면 에너지는

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{(1.00\times10^{-6}\text{kg})(3.00\times10^{-2}\text{m/s})^2}{2} = 4.50\times10^{-10}\text{J}$$

n에 대해서 풀면

$$n = \frac{\sqrt{8mL^2E}}{h} = \frac{\sqrt{(8.00\times10^{-10}\text{kg}\cdot\text{m}^2)(4.50\times10^{-10}\text{J})}}{6.626\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}} = 9.05\times10^{23}$$

、$n_1 = 9.05\times10^{23}$과 $n_2 = 9.05\times10^{23}+1$ 간의 에너지 차이는 10^{-23}J 밖에 되지 않는다.
、질량과 길이가 클 경우 양자 예측이 고전적인 결과와 위배되지 않는다.

예제 6.6 원자의 모형

상자안의 입자 모형을 이용하여 전자 하나가 n=1인 상태에서 n=2인 상태로 올라갈 때 필요한 에너지가 몇 eV인지를 구하라. 원자의 반지름은 0.100nm 라고 가정하라.

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_eL^2} = \frac{\pi^2(197.3\text{eV}\cdot\text{nm/c})^2}{2(511\times10^3\text{eV/c}^2)(0.200\text{nm})^2}$$
$$= 9.40\text{eV}$$

$$E_2 = (2)^2E_1 = 4(9.40\text{eV}) = 37.6\text{eV}$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 37.6\text{eV} - 9.40\text{eV} = 28.2\text{eV}$$

이와 같은 천이를 일으키는 광자의 파장은

$$\lambda = hc/\Delta E = (1.24\times10^3\text{eV}\cdot\text{nm})(28.2\text{eV})$$
$$= 44.0\text{nm}$$

과잉 단순화된 모형은 가장 낮은 준위들 간의 천이에 대해서는 좋은 결과를 가져오지만 높은 에너지 준위로 올라감에 따라 점점 더 부정확해진다.

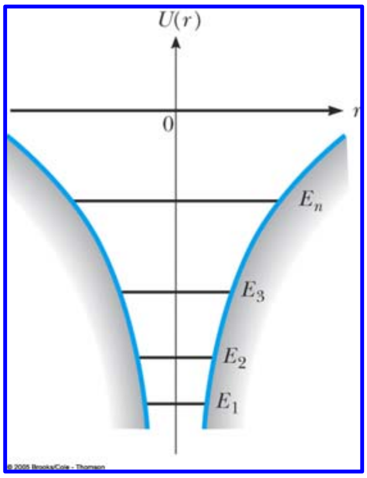


그림 6.8 (예제 6.6) 전자 한 개를 가진 원자의 거리 r에 따른 퍼텐셜 에너지 함수의 모형

연습문제 1. 벽 사이의 거리가 0.200nm인 상자 안의 입자 모형을 사용하여 원자 내의 전자가 가질 수 있는 최소 속력을 구하라.

답 $1.82\times10^6\text{m/s}$

상자 안에 있는 입자의 정상 상태

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad 0 < x < L,\ \ n = 1,\ 2,\ \cdots \qquad (6.18)$$

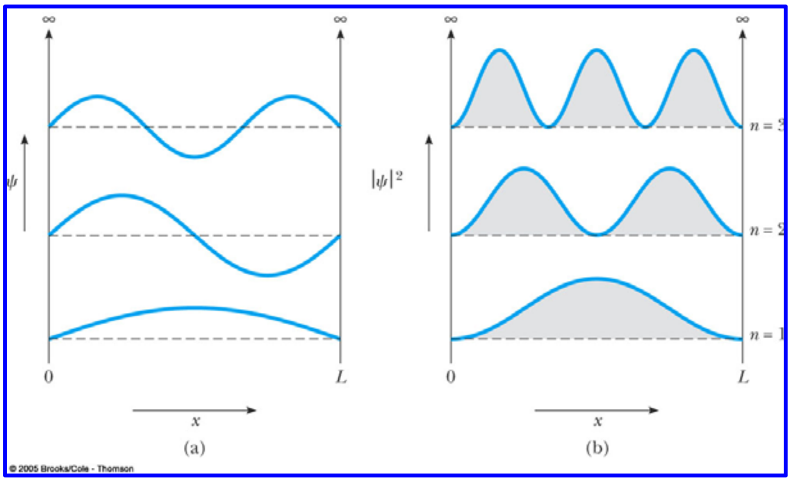


그림 6.9 일차원 상자에 구속된 입자의 처음 세 개의 가능한 정상 상태 (a) n=1,2,3에 대한 파동 함수. (b) n=1,2,3에 대한 확률분포

상자 내에서 입자를 발견할 확률

- 입자 발견 확률이 일정하지 않다.
- 최대 지점과 발견 불가능 지점이 있다.
- 입자는 모든 위치를 점유하면서 이동한다.
- 양자역학의 대상은 입자가 아니라, 입자성과 파동성을 동시에 지닌 더 복잡한 것이다.

파동함수의 규격화

모든 확률의 합은 1이다.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$2\sin^2\theta = 1 - \cos 2\theta$를 이용하여

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{2}\int_0^L [1 - \cos(2n\pi x)] dx = \frac{L}{2}$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \qquad (6.19)$$

예제 6.7 상자 안에 있는 입자에 대한 확률

무한 네모 우물 안에서 바닥상태에 있는 입자. $x = L/4$와 $x = 3L/4$ 사이의 구간에 존재할 확률을 구하라.

$$P = \int_{L/4}^{3L/4} |\psi_1|^2 dx = \left(\frac{2}{L}\right)\int_{L/4}^{3L/4} \sin^2(\pi x/L) dx$$

$$= \left(\frac{1}{L}\right)\int_{L/4}^{3L/4} [1 - \cos(2\pi x/L)] dx$$

$$= \left(\frac{1}{L}\right)\left[\frac{L}{2} - \left(\frac{L}{2\pi}\right)\sin(2\pi x/L)\,\Big|_{L/4}^{3L/4}\right]$$

$$= \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2\pi}\right)[-1 - 1] = 0.818$$

연습문제 2 예제 6.7의 계산을 무한 사각 우물에 있는 입자의 n 번째 상태에 대해서 다시 해 보고, 이 값이 $n \to \infty$의 극한에서 1/2이 됨을 보여라

전하 결합 소자(CCD)

CCD(charge-coupled device)

- 디지털 카메라의 image sensor
- 퍼텐셜 우물(전자상자)에 전자를 잡아두는 역할을 한다.
- 광자의 90% 정도 검출. ↔ 사진유제(2-3% 검출)
- 희미한 물체와 밝은 물체를 모두 정확히 측정한다. ↔ 사진건판의 100배 이상 우수.

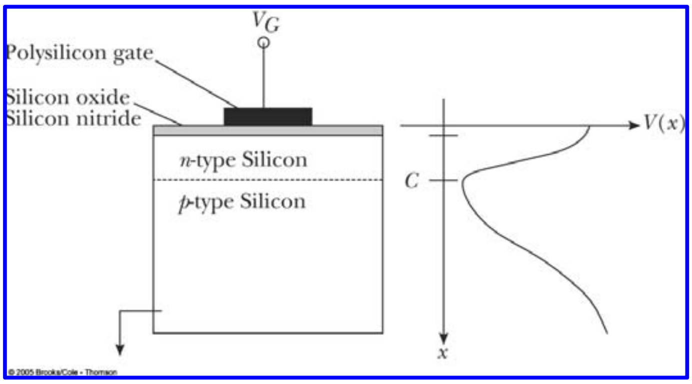


그림 6.11 CCD 어레이에서 픽셀 하나의 구조

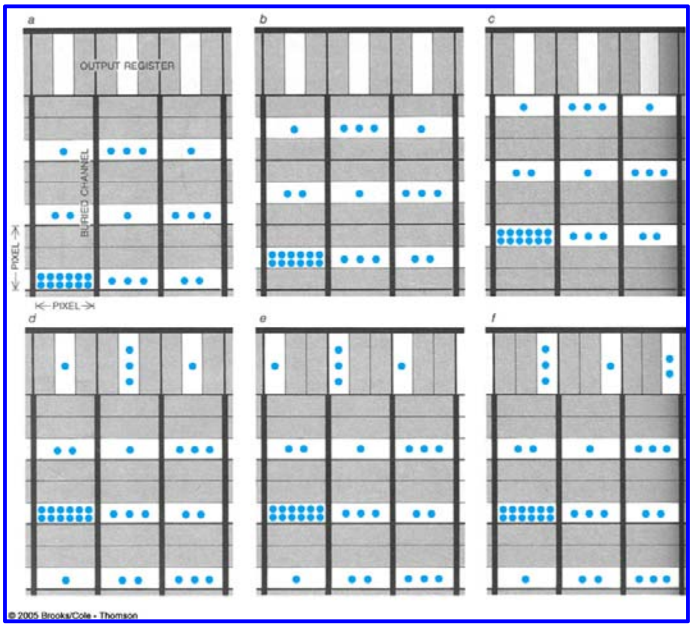


그림 6.12 CCD 이미지 기계의 작동 원리를 일련의 대략적인 그림으로 나타내었다.

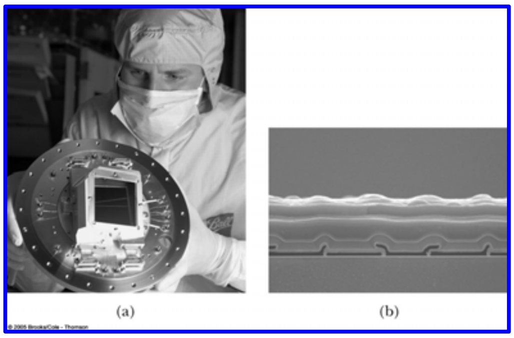
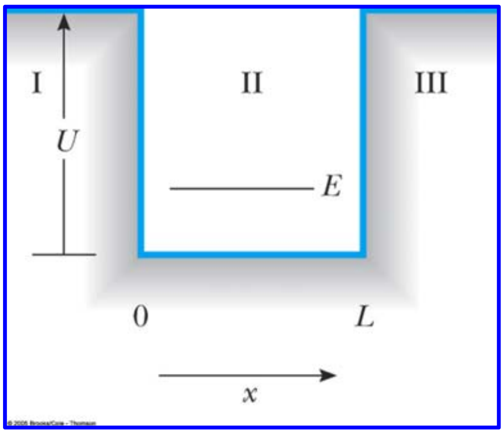


그림 6.13 (a) 허블 우주 망원경에 탑재된 ACS CCD. (b) CCD 이미지 센서의 픽셀의 단면 모습

6.5 유한 사각 우물



유한 사각 우물

고전적 입자

ㆍE<U : 우물내부에만 존재. 영원히 구속

ㆍE>U : 우물외부 운동에너지=E-U

$E < U$인 입자

우물 내부 $U = 0$이므로

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

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

$\psi(x) = Ae^{ikx}$; 진동함수

우물 외부 $U(x) = U$이므로

ㆍ우물 외부에서 입자가 존재한다.

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

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

$$\alpha^2 = \frac{2m(U-E)}{\hbar^2} > 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha^2\psi(x) \quad x < 0 \text{ and } x > L$$

$$\psi(x) = Ae^{+\alpha x} \quad x < 0 \qquad (6.20)$$
$$\psi(x) = Be^{-\alpha x} \quad x > L$$

에너지의 양자화 : 우물 내부와 외부의 파동함수와 이들의 도함수가 $x = 0, x = L$에서 연속이어야 한다.→특정 E에 대해서만 만족

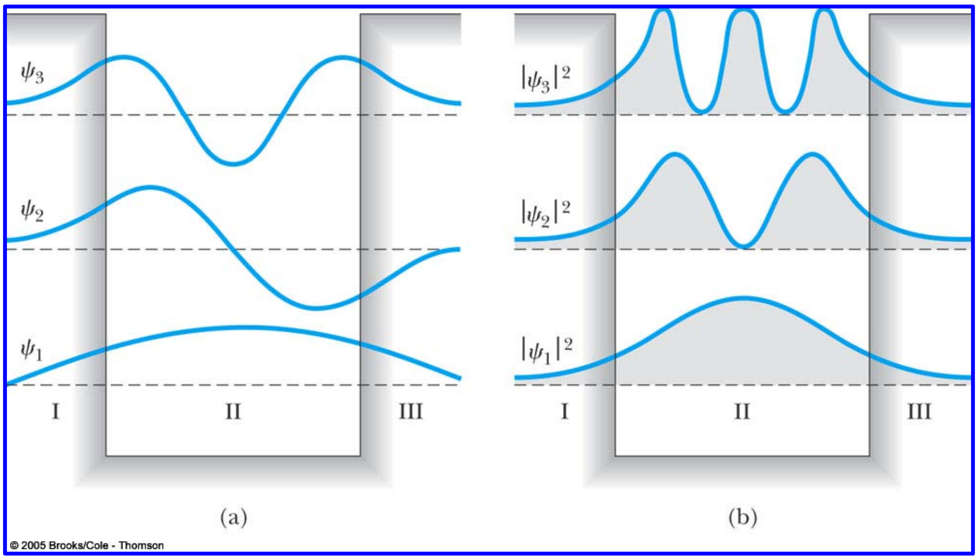


그림 6.16 (a) 유한 높이의 퍼텐셜 우물에 들어 있는 입자에 관한 가장 낮은 세 에너지 상태의 파동 함수. (b) 유한 높이의 퍼텐셜 우물 안의 입자에 관한 가장 낮은 세 에어지 상태의 확률 밀도.

허용 에너지의 어림

무한 우물에 비해 우물 안의 드브로이 파장이 증가하고, 이로 인해 입자의 운동량과 에너지를 낮춘다.

투과 깊이(penetration depth) : 우물의 끝에 비해 파동의 진폭이 1/e 만큼 줄어든다.

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}}$$

$$E_n \approx \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(L+2\delta)^2} \qquad n = 1, 2, \cdots \qquad (6.22)$$

δ자신도 에너지에 의존하므로 수치 해석적으로 푼다.

예제 6.8 구속된 전자

$U = 100\mathrm{eV}$, $L = 0.200\mathrm{nm}$ 우물에 갇힌 전자의 바닥상태 에너지를 어림하여라.

$E \ll U$일 것이므로, 우선 E를 무시하고 투과 깊이를 구한다.

$$\delta \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2mU}} = \frac{(197.3\mathrm{eV}\cdot\mathrm{nm/c})}{\sqrt{2(511\times10^3\mathrm{eV/c^2})(100\mathrm{eV})}} = 0.0195\mathrm{nm}$$

우물의 폭은 $L + 2\delta = 0.239\mathrm{nm}$

$$E \approx \frac{\pi^2(197.3\mathrm{eV}\cdot\mathrm{nm/c})^2}{2(511\times10^3\mathrm{eV/c^2})(0.239\mathrm{nm})^2} = 6.58\mathrm{eV}$$

이 에너지로부터 투과깊이를 다시 구하여 에너지를 더 정확히 구하는 과정을 반복한다.

$$U - E = 93.42\mathrm{eV}$$

$$\delta \approx \frac{(197.3\mathrm{eV}\cdot\mathrm{nm/c})}{\sqrt{2(511\times10^3\mathrm{eV/c^2})(93.42\mathrm{eV})}} = 0.0202\mathrm{nm}$$

$$E = 6.53\mathrm{eV}$$

위의 과정을 반복한다. 실제 값은 $E = 6.52\mathrm{eV}$

예제 6.9 유한 우물의 에너지: 정확한 계산 방법

유한 사각 우물에서의 에너지의 양자화를 구한다.

$$\alpha = [2m(U-E)/\hbar^2]^{1/2},\ k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$$

$\psi(x) = C\sin kx + D\cos kx \quad 0 < x < L$: 우물 내부

$\psi(x) = Ae^{+\alpha x} \quad x < 0$: 우물 외부

$\psi(x) = Be^{-\alpha x} \quad x > L$

파동함수와 기울기가 연속이어야 한다.

$x = 0$에서의 연속조건

$A = D \qquad$ (ψ의 연속)

$\alpha A = kC \qquad$ ($\frac{d\psi}{dx}$의 연속)

두 번째 식을 첫 번째 식으로 나눈다.

$$\frac{C}{D} = \frac{\alpha}{k}$$

$x = L$에서의 연속조건

$C\sin kL + D\cos kL = Be^{-\alpha L} \qquad$ (ψ의 연속)

$kC\cos kL - kD\sin kL = -\alpha Be^{-\alpha L} \qquad$ ($\frac{d\psi}{dx}$의 연속)

두 번째 식을 첫 번째 식으로 나눈다.

$$\frac{(\alpha/k)\cos kL - \sin kL}{(\alpha/k)\sin kL + \cos kL} = -\frac{\alpha}{k} \qquad (*)$$

(*)은 특정한 E에 대해서만 성립한다.

､수치해석법으로 구한다.

､에너지의 양자화

연습문제 4 예제 6.9의 결과를 이용하여 폭이 0.200 nm이고 높이가 100eV인 사각 우물에 속박되어 있는 전자의 바닥상태 에너지가 약 6.52 eV임을 보여라.

6.6 양자 진동자

선형 복원력을 받는 입자

$F = -Kx$: 선형 복원력

$U = \frac{1}{2}Kx^2$: 퍼텐셜 에너지

안정한 평형점에서 조금 벗어난 물체

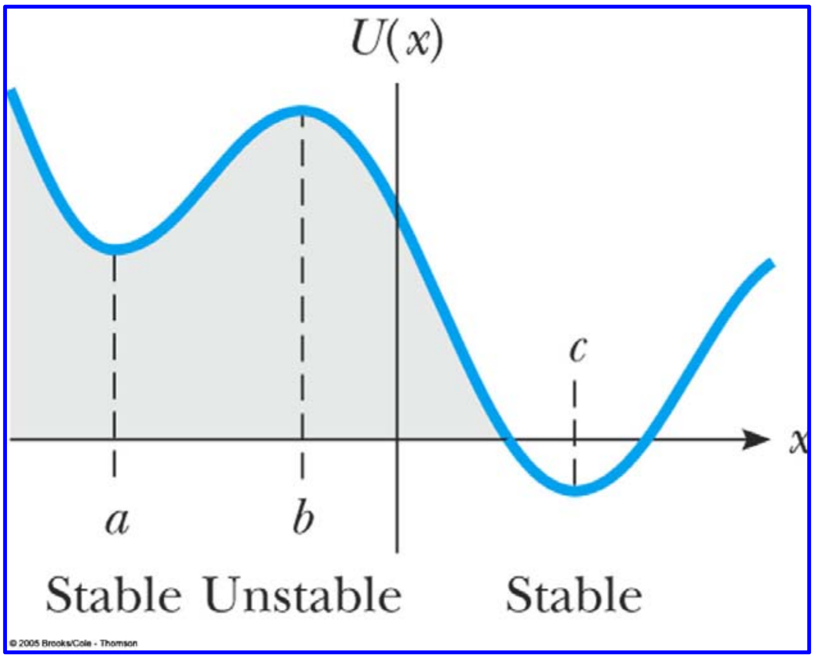


그림 6.17 일반적인 퍼텐셜 에너지 함수 U(x)

안정된 평형

$$\frac{dU}{dx} = 0 \text{ and } \frac{d^2U}{dx^2} > 0$$

불안정한 평형

$$\frac{dU}{dx} = 0 \text{ and } \frac{d^2U}{dx^2} < 0$$

안정된 평형의 근처에서의 퍼텐셜

$$U(x) = U(a) + \frac{1}{2}K(x-a)^2 \qquad (6.23)$$

$$K = \left.\frac{d^2U}{dx^2}\right|_a \qquad (6.24)$$

좌표 원점을 x=a 로 옮기고 U(a)=0 으로 취하면 → 일반적인 조화진동자의 운동에너지

어떤 안정 평형점에서라도 거기서 약간 벗어난 입자는 마치 힘 상수 K인 용수철에 매달린 물체와 똑같이 행동하는데, 이 K는 평형점에서 실제 퍼텐셜 에너지의 곡률과 같도록 잡아준다.

$$U(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

양자 진동자의 Schrödinger 방정식

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - E\right)\psi(x) \qquad (6.25)$$

바닥 상태의 파동함수는 ← 사각우물의 최저 에너지 상태들에 대한 경험으로부터

1. ψ는 퍼텐셜 우물의 중앙점인 $x=0$을 중심으로 대칭이어야 한다.
2. ψ는 마디가 없어야 하고, $|x|$가 커짐에 따라 영으로 접근해야 한다.

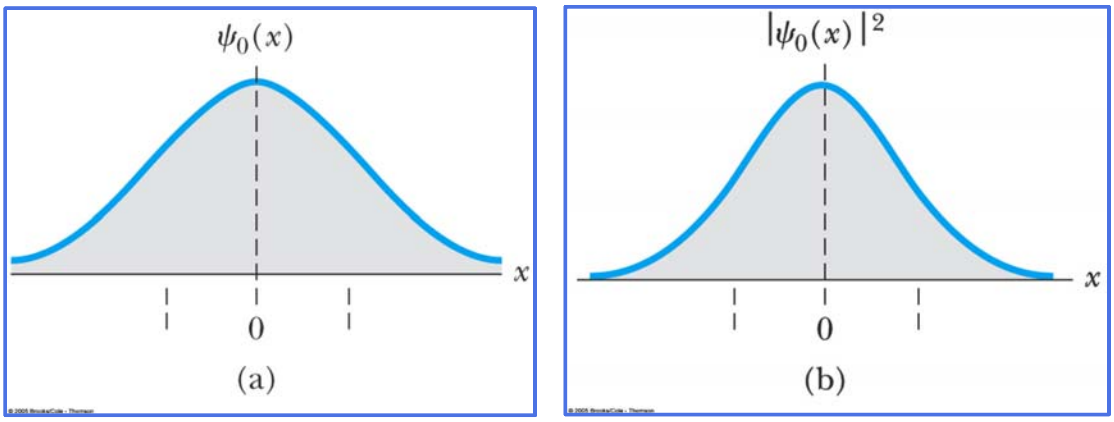


그림 6.18 (a) 진동자 퍼텐셜 우물 안에 있는 입자의 바닥상태의 파동함수. (b) 진동자 퍼텐셜 우물 안에 있는 입자의 바닥상태에 대한 확률 밀도. 수직 점선은 고전적 입자의 진동 한계 $x = \pm A = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$

가장 간단한 해 ; Gauss 함수

$$\psi(x) = C_0 e^{-\alpha x^2} \qquad (6.26)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \{4\alpha^2 x^2 - 2\alpha\}C_0 e^{-\alpha x^2} = \{4\alpha^2 x^2 - 2\alpha\}\psi(x)$$

식 6.25와 비교하여

$$4\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{2}m\omega^2 \quad \text{or} \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \qquad (6.27)$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = 2\alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \quad \text{or} \quad E = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (6.28)$$

바닥상태의 파동함수는

$$\psi_0(x) = C_0\exp(-m\omega x^2/2\hbar)$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

예제 6.10 진동자 바닥상태 파동 함수의 규격화

진동자의 바닥상태 파동함수

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

파동함수의 규격화

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx = 1$$

적분공식

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad a > 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = C_0^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

규격화 상수

$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

예제 6.11 고전적인 진동자의 진동 한계

양자 진동자의 바닥상태 에너지와 같은 에너지를 갖는 고전적인 진동자의 진동 한계를 구하라

바닥상태의 에너지 : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega,$

진동한계 : $x = \pm A$

고전적 진동자의 에너지 : $\frac{1}{2}KA^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \quad \text{or} \quad A = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

예제 6.12 비고전적인 영역의 양자 진동자

같은 에너지를 갖는 고전적인 진동자의 허용 영역 밖에서 바닥상태에 있는 양자 진동자가 발견될 확률을 구하라.

$$P = \int_{-\infty}^{-A} |\psi_0|^2 dx + \int_{A}^{\infty} |\psi_0|^2 dx$$

ψ_0의 대칭성으로부터

$$P = 2\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{A}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx$$

변수변환 : $z = \sqrt{m\omega/\hbar}\,x,\quad A = \sqrt{\hbar/m\omega}$는 $z = 1$ 에 해당

$$P = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{1}^{\infty} e^{-z^2} dz = 0.157$$

erfc(y) : complementary error function(보상 에러 함수)

$$P = \mathrm{erfc}(1) = 0.157$$

즉 16%가 고전 진동자의 허용영역 밖에서 발견된다.

양자진자의 파동함수

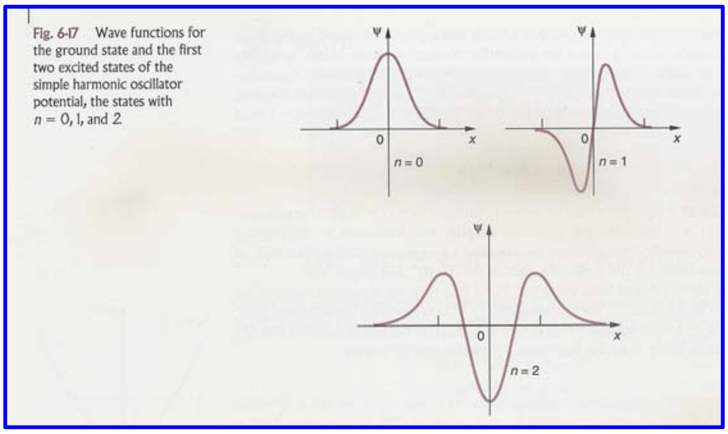
$$u = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x = \gamma x$$

$$\psi_n(u) = C_n e^{-(1/2)u^2} f_n(u)$$

$$C_n = \left(\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}\,2^2 n!}\right)^{1/2} \quad : \text{정규화 상수}$$

$f_n(u)$: Hermite polynomial(헤르밑 다항식)

$$f_0(u) = 1$$
$$f_1(u) = 2u$$
$$f_2(u) = 2 - 4u^2$$
$$f_3(u) = 12u - 8u^3$$
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2 \cdots$$



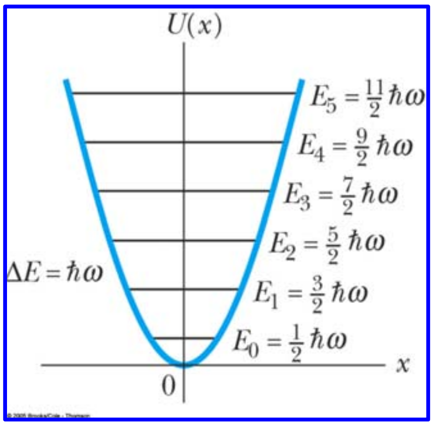


그림 단조화진동자 퍼텐셜의 바닥상태와 첫 번째 들뜬상태에 대한 파동함수

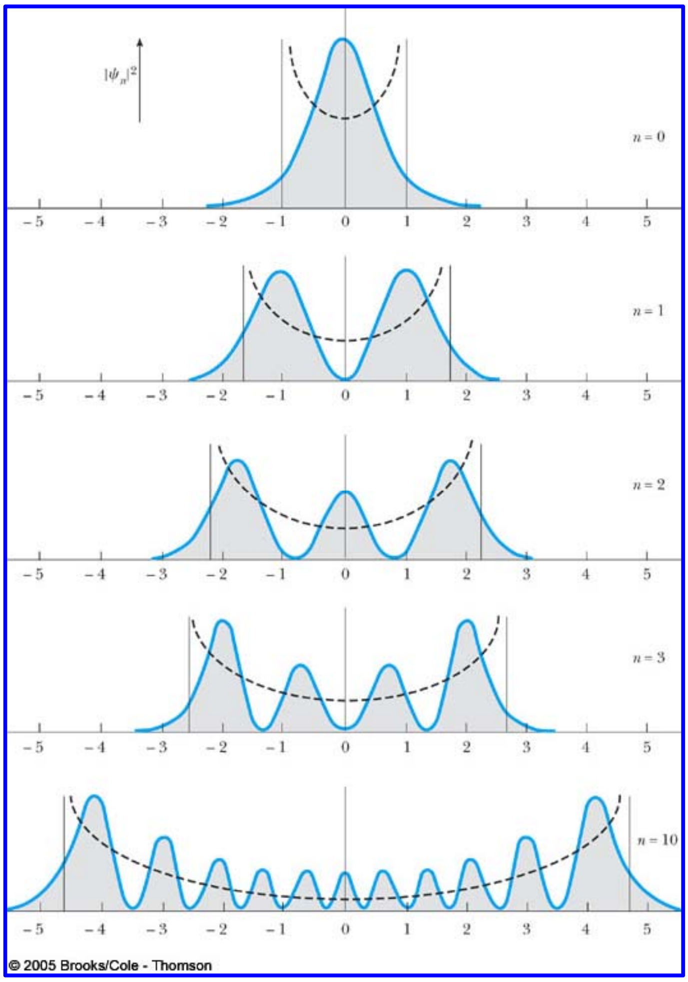


그림 6.20 양자 진동자의 몇몇 상태에 대한 확률 밀도. 같은 에너지를 갖는 고전적인 확률은 점선으로 표시하였다.

예제 6.13 진동 에너지의 양자화

용수철에 매달린 질량의 운동의 진폭은 진동자의 에너지의 양자화로 어떻게 설명이 가능한가?

거시적인 진동자 $m=0.0100\text{kg},\ K=0.100\text{N/m}$

$$\omega=\sqrt{K/m}=3.16\,\text{rad/s}\quad T=2\pi/\omega=1.99\,\text{s}$$

$$\Delta E=\hbar\omega=(6.582\times10^{-16}\text{eV}\cdot\text{s})(3.16\,\text{rad/s})=2.08\times10^{-15}\text{eV}$$

원자수준의 진동자 : 수소분자의 진동

$$K=510.5\,\text{N/m},\ \mu=8.37\times10^{-28}\text{kg}\ :\ \text{환산질량}$$

$$\omega=\sqrt{\frac{K}{\mu}}=\sqrt{\frac{510.5\,\text{N/m}}{8.37\times10^{-28}\text{kg}}}=7.81\times10^{14}\text{rad/s}$$

$$\Delta E=\hbar\omega=0.513\,\text{eV}$$

♣♣♣♣♣Tipler♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣♣

6-8 단조화진동자

용수철에 매달린 물체의 문제

$$F=-Kx$$

$$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad (6\text{-}62)$$

$$\omega=\sqrt{\frac{K}{m}}=2\pi f$$

단조화진동자 근사

1) x=0, f(0)=0 : 평형점, 평형상태

2) 기체나 고체안에서의 분자진동

§고전물리 : Newton의 운동법칙

$$m\frac{d^2x}{dt^2}=-Kx=-m\omega^2x$$

1) 해 : $x=A\cos(\omega t+\phi)$

2) $E=\frac{1}{2}KA^2=\frac{1}{2}m\omega^2A^2$ (6-63)

3) $|x|<A$ 에 갇혀서 앞뒤로 운동

4) dx 내에서 입자를 발견할 확률 $\propto\frac{dx}{v}$

$$\frac{1}{2}mv^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E$$

따라서 고전론적 확률은

$$P_c(x)dx\ \propto\frac{dx}{v}=\frac{dx}{\sqrt{(2/m)(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)}} \qquad (6\text{-}64)$$

5) 최소 Energy =0 , 어떠한 에너지 값도 가능

§양자역학

Schroedinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x)=E\psi(x) \qquad \text{(6-65)}$$

→Eigenvalue equation

1) $x>A\rightarrow V(x)>E$

$$\psi''(x)=\alpha^2\psi(x) \quad \text{and} \quad \alpha^2=(2m/\hbar^2)[V(x)-E]>0$$

이므로 ⇒특정한 Energy 값 E_n에 대해서만 얌전한 해

최소 에너지 : $\hbar\omega$ or $\frac{1}{2}\hbar\omega$

2) 얌전한 해(well behaved solution)를 구한다

차원이 없고 x에 비례하는 변수 u로 변수변환

$$u=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x=\gamma x$$

$$\gamma\equiv(m\omega/\hbar)^{1/2}$$

$$\frac{d\psi}{dx}=\gamma\frac{d\psi}{du},\ \ \frac{d^2\psi}{dx^2}=\gamma^2\frac{d^2\psi}{du^2}$$

이므로 (6-65)식은

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\psi''(u)+\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}u^2\psi=E\psi$$

$$\alpha\equiv\frac{2E}{\hbar\omega} \qquad \text{(6-66)}$$

로 두면 Schroedinger equation은 다음과 같이 된다.

$$\psi''(u)=(u^2-\alpha)\psi(u) \qquad \text{(6-67)}$$

⇒Schroedinger equation, Eigenvalue equation

단진자(입자)의 모든 정보는 (6-67)식을 풀어서 얻는다.

얌전한 해

정규화 조건을 따라야한다.

$$\int\psi^*(x)\psi(x)dx=1$$

을 만족하기 위해서는 $u\rightarrow\infty$ 일 때 $\psi(x)\rightarrow 0$

(6-67)식의 해는 다음과 같다.

$$\psi_n(u)=C_ne^{-(1/2)u^2}f_n(u) \qquad \text{(6-68)}$$

$$C_n=\left(\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}\,2^2n!}\right)^{1/2}$$: 정규화 상수

$f_n(u)$: Hermite polynomial(헤르밑 다항식)

$$f_0(u)=1 \qquad \text{(6-69)}$$

$$f_1(u)=2u$$

$$f_2(u)=2-4u^2$$

$$f_3(u)=12u-8u^3$$

$\alpha_n=2n+1$인 α 값에서만 얌전한 해가 된다.

$$\alpha_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} \qquad \text{이므로}$$

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (6\text{-}70)$$

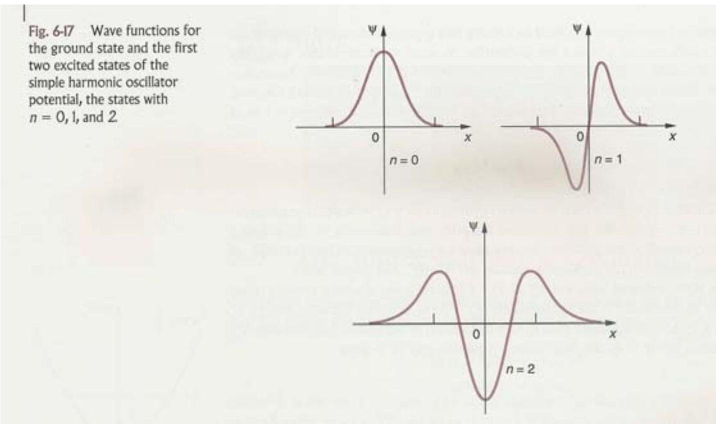


그림 6-15 단조화진동자 퍼텐셜의 바닥상태와 첫 번째 들뜬상태에 대한 파동함수

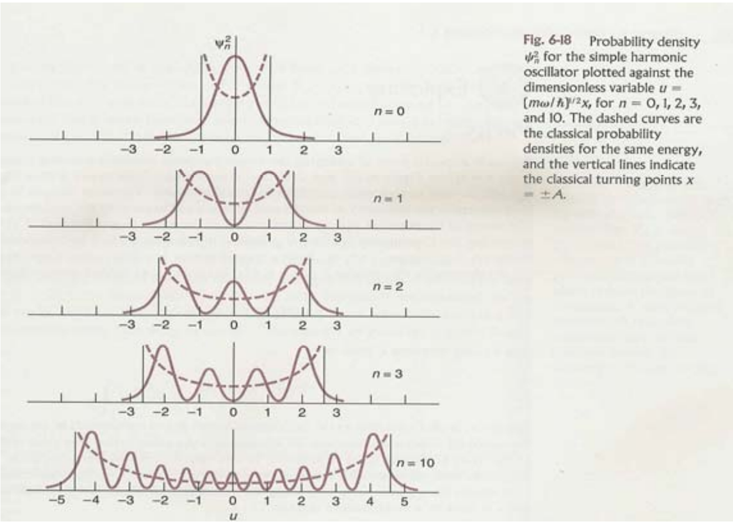


그림 6-16 단조화진동자에 대한 확률밀도 $\psi^2(x)$. 점선은 고전론적 확률밀도

※Hermite 다항식의 특성

1) f_n : odd parity when n = odd (u의 홀수 곱의 항)

f_n : even parity when n = even (u의 짝수 곱의 항)

2) 에너지 전이

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) x \psi_m(x) dx = 0 \quad \text{if} \quad n \neq m \pm 1$$

선택율 $\Delta n = \pm 1$

3) 방출 또는 흡수되는 광자의 Energy는 항상

$$\Delta E_n = \hbar\omega$$

→진동자의 고전론적 진동수와 같다. Plank의 흑체복사

§방정식(6-67)을 푸는 방법

$$\psi''(u) = (u^2 - \alpha)\psi(u) \tag{6-67}$$

1. u → ∞일 때 $\alpha\psi \ll u^2\psi$ 이므로 근사적으로

$$\psi''(u) \approx u^2\psi$$

이므로 근사해는 $\psi_0(u) = Ce^{-(1/2)u^2}$ 이다.

$$\psi_0' = -uCe^{-(1/2)u^2} = -u\psi_0 \tag{6-72}$$

$$\psi_0'' = -u\psi_0' - \psi_0 = (u^2-1)\psi_0 \tag{6-73}$$

이므로 u 가 클 때 $\psi''(u) \approx u^2\psi$을 만족한다.

$\alpha = 1$ 이면 ψ_0가 u의 모든 값에서 (6-67)식의 해가된다.

$$\psi_0'' = (u^2-1)\psi_0 = (u^2-\alpha)\psi_0 \qquad (\alpha = 1 \text{ 이면})$$

$\alpha = 1$에 대응하는 에너지는

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \text{이다.}$$

2. 다른 얌전한 해를 구한다.

$$\psi(u) = \psi_0 f(u) \tag{6-74}$$

로 가정하면

$$\psi' = \psi_0' f + \psi_0 f'$$
$$\psi'' = \psi_0'' f + 2\psi_0' f' + \psi_0 f''$$

(6-72)식과 (6-73)식을 이용하면

$$\psi'' = (u^2-1)\psi_0 f - 2u\psi_0 f' + \psi_0 f''$$

따라서 (6-67)식은

$$[(u^2-1)f - 2uf' + f'']\psi_0 = (u^2-\alpha)\psi_0 f$$

또는

$$f'' - 2uf' + (\alpha - 1)f = 0 \tag{6-75}$$

Hermite 방정식

또 f(u)는 파동함수가 정규화될 수 있도록

$$e^{-(1/2)u^2} f(u) \to 0 \qquad (u \to \infty \text{ 일 때})$$

을 만족해야 한다.

3. Hermite 방정식의 해로 무한 급수해를 가정한다.

$$f(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + \cdots$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n$$

$\psi(x)$는 기함수이거나 우함수 이어야 한다.

우함수인 해 : u의 짝수 거듭제곱항만 포함, $a_0 = 1,$ 즉 $f = 1$이 가능

기함수인 해 : u의 홀수 거듭제곱항만 포함, $a_1 = 1,$ 즉 $f = u$이 가능

(6-75)식을 이용하여 a_n으로부터 a_{n+2}를 구할 수 있다

$$f\ ' = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n u^{n-1}$$

그리고

$$-2uf\ ' = -2\sum_{n=0}^{\infty} n a_n u^n$$

2차도함수는

$$f\ '' = \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m u^{m-2}$$

합지수를 바꾸어

$$f\ '' = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} u^n$$

으로 쓸 수 있다. 이들을 Hermite 방정식에 대입하면

$$\sum_{n=0}^{\infty} [(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (\alpha - 1)a_n] u^n = 0$$

이 방정식이 성립하자면 u의 각 차수의 계수가 0이 되어야하므로

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\alpha}{(n+2)(n+1)} a_n \qquad \text{(6-76)}$$

회귀방정식(recursion formula)

4. 급수의 수렴성

$$e^{-(1/2)u^2} f(u) \to 0 \quad (u \to \infty \text{ 일 때})$$

그러나 (6-76)식을 만족하는 급수는 이 요구를 만족하지 않는다.

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \to \frac{2}{n} \quad (n \to \infty \text{ 일 때})$$

이 급수는 다음 급수처럼 행동한다.

$$e^{+u^2} = 1 + u^2 + \frac{u^4}{2!} + \cdots \frac{+u^n}{\left(\frac{1}{2}n\right)!} + \frac{n^{n+2}}{\left(\frac{1}{2}n+1\right)!}$$

e^{+u^2}의 급수는

$$\frac{b_{n+2}}{b_n} = \frac{\left(\frac{1}{2}n\right)!}{\left(\frac{1}{2}n+1\right)!} = \frac{1}{\frac{1}{2}n+1} \to \frac{2}{n} \qquad (n\text{가 클 때})$$

이기 때문에 (6-75)식을 만족하는 무한 급수로는 u→∞일 때 얌전한 파동함수가 되지 않는다.

5. 이 급수를 유한화한다.

f(u)가 유한개의 항으로 된 다항식 f(u)이면 어떤 다항식 $f_n(u)$에 대해서도

$$e^{-(1/2)u^2} f_n(u) \to 0 \quad (u \to \infty \text{ 일 때})$$

어떤 값 n에서 $a_{n+2} = 0$ 이면 a_{n+4}이상의 모든 계수도 0이 된다.

$$2n + 1 - \alpha = 0 \text{이면 } a_{n+2} = 0 \text{이고}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

이 E값에 대해서 파동함수는

$$\psi_n(u) = C_n e^{-(1/2)u^2} f_n(u)$$

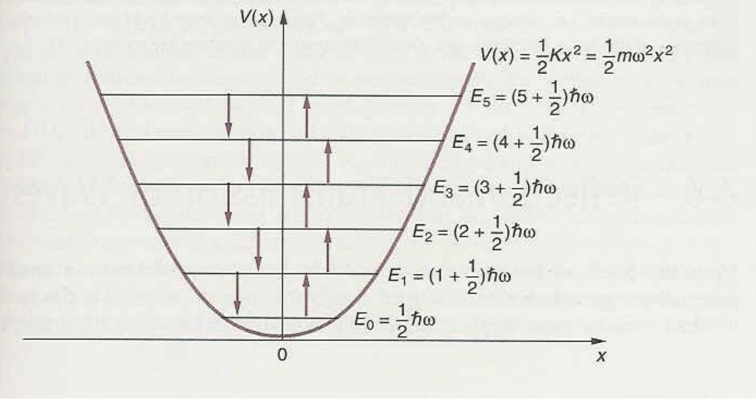


Fig. 6-19 Energy levels in the simple harmonic oscillator potential. Transitions obeying the selection rule $\Delta n = \pm 1$ are indicated by the arrows (those pointing up indicate absorption). Since the levels have equal spacing, the same energy $\hbar\omega$ is emitted or absorbed in all allowed transitions. For this special potential, the frequency of the emitted or absorbed photon equals the frequency of oscillation, as predicted by classical theory.

$$\Delta E_n = \hbar\omega$$

♣♣♣♣♣Tipler♣♣

6.7 기댓값

$\psi(x,t)$가 제공하는 측정 가능한 양에 대한 정보

에너지(E) : 선명한 양(sharp quantity). 불연속적인 허용되는 양

위치(x) : 흐릿한 양(fuzzy quantity). 입자 발견의 확률

입자의 평균 위치

Table 6.1 Hypothetical Data Set for Position of a Particle as Recorded in Repeated Trials

Trial	Position (arbitrary units)	Trial	Position (arbitrary units)	Trial	Position (arbitrary units)
1	$x_1 = 2.5$	7	$x_7 = 8.0$	13	$x_{13} = 4.2$
2	$x_2 = 3.7$	8	$x_8 = 6.4$	14	$x_{14} = 8.8$
3	$x_3 = 1.4$	9	$x_9 = 4.1$	15	$x_{15} = 6.2$
4	$x_4 = 7.9$	10	$x_{10} = 5.4$	16	$x_{16} = 7.1$
5	$x_5 = 6.2$	11	$x_{11} = 7.0$	17	$x_{17} = 5.4$
6	$x_6 = 5.4$	12	$x_{12} = 3.3$	18	$x_{18} = 5.3$

입자 위치의 반복적인 측정으로 평균 위치를 구한다.

$$\bar{x} = \frac{(2.5+3.7+1.4+\cdots+5.4+5.3)}{18} = 5.46$$

또 다른 평균위치의 계산

$$1.4\left(\frac{1}{18}\right)+2.5\left(\frac{1}{18}\right)+\cdots+5.4\left(\frac{3}{18}\right)$$
$$+6.2\left(\frac{2}{18}\right)+\cdots+8.8\left(\frac{1}{18}\right)=5.46$$

입자의 평균 위치를 계산하는 일반적인 식

$$\bar{x} = \sum x P_x \qquad (6.30)$$

위치의 평균값 : 위치의 기댓값(expectation value)

$$< x > \; = \int_{-\infty}^{\infty} x \,|\, \Psi(x,t) \,|^2 dx \qquad (6.31)$$

$$< f > \; = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \,|\, \Psi(x,t) \,|^2 dx \qquad (6.32)$$

입자의 위치에 대한 양자역학적인 불확정도

표준 편차

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N}} \qquad (6.33)$$

$$\frac{\sum (x_i)^2}{N} - 2(\bar{x})\frac{\sum (x_i)}{N} + \frac{\sum (\bar{x})^2}{N} = \overline{(x^2)} - 2(\bar{x})(\bar{x}) + (\bar{x})^2$$
$$= \overline{(x^2)} - (\bar{x})^2$$

따라서

$$\sigma = \sqrt{\overline{(x^2)} - (\bar{x})^2}$$

위치의 양자역학적인 불확정도

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} \qquad (6.34)$$

예제 6.14 평균값으로부터의 표준 편차

표 6.1의 자료의 경우 $\overline{(x^2)}$과 표준 편차를 구하라.

$$\overline{(x^2)} = \frac{\sum (x_i)^2}{N} = \frac{603.91}{18} = 33.55$$

$$\sigma = \sqrt{33.55 - (5.46)^2} = 1.93$$

예제 6.15 상자 안에 있는 입자의 위치

바닥상태에 있는 상자 안의 입자에 대한 평균 위치와 위치의 불확정도를 구하라.

확률 밀도

$$|\Psi|^2 = (2/L)\sin^2(n\pi x/L)$$

바닥상태 n=1

$$< x > = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\Psi|^2 dx = \left(\frac{2}{L}\right)\int_0^L x\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)dx$$

$\theta = \pi x/L, \quad d\theta = \pi dx/L$로 치환한다.

$$< x > = \frac{2L}{\pi^2}\int_0^{\pi} \theta \sin^2\theta\, d\theta$$

$2\sin^2\theta = 1 - \cos 2\theta$를 이용하여

$$< x > = \frac{L}{\pi^2}\left(\int_0^{\pi}\theta d\theta - \int_0^{\pi}\theta\cos 2\theta d\theta\right) = \frac{L}{\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{2} - 0\right) = \frac{L}{2}$$

$< x^2 >$의 계산. $\theta = \pi x/L$로 변수 치환하여

$$< x^2 > = \frac{L^2}{\pi^3}\left(\int_0^{\pi}\theta^2 d\theta - \int_0^{\pi}\theta^2\cos 2\theta d\theta\right)$$

$$\int_0^{\pi}\theta^2 d\theta = \frac{1}{3}\theta^3\Big|_0^{\pi} = \frac{\pi^3}{3}$$

$$\int_0^{\pi}\theta^2\cos 2\theta d\theta = -\int_0^{\pi}\theta\sin 2\theta d\theta = \frac{1}{2}\theta\cos 2\theta\Big|_0^{\pi} = \frac{\pi}{2}$$

$$< x^2 > = \frac{L^2}{\pi^3}\left(\frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2}\right) = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2\pi^2}$$

따라서 위치의 불확정도는

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} = L\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} - \frac{1}{4}} = 0.181L$$

、$L/2 \pm 0.181L$의 구간에 있을 확률이 크다.

、시간에 무관하다.

※정상상태에서는 모든 평균값들과 확률들은 시간에 의존하지 않는다.

입자의 평균 운동량

운동량의 기댓값은 식 6.32로 표현되지 않는다. → 불확정성의 원리에 위배

$$< p > = m\frac{d < x >}{dt}$$

$$< p > = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}dx \qquad (6.36)$$

연습문제 5 상자 내에 있는 입자는 어떤 상태에서든지 <p>=0 임을 보여라.

6.8 관측 가능량과 연산자

、관측 가능량 : 입자의 위치, 운동량, 운동 에너지, 퍼텐셜 에너지
、각 관측 가능량마다 연산자 하나씩 대응된다.
、파동함수 Ψ는 관측 가능하지 않다.

$$< Q >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* [Q] \Psi dx$$

Q : 관측 가능량, $[Q]$: 대응 연산자

위치에너지 연산자 : $[U] = U(x)$

$$< U >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* [U] \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* U(x) \Psi dx$$

운동에너지 연산자 : $[K] = ([p])^2/2m = (-\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$

$$< K >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* [K] \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx$$

입자의 평균적인 전체 에너지

$$< E >=< K >+< U >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right\} \Psi dx$$

하밀토니안(Hamiltonian)

$$[H] =- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

$$[H]\Psi = E\Psi$$

에너지 연산자

$$[E] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Table 6.2 Common Observables and Associated Operators

Observable	Symbol	Associated Operator
Position	x	x
Momentum	p	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
Potential energy	U	$U(x)$
Kinetic energy	K	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
Hamiltonian	H	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$
Total energy	E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$