

$$\oint (\vec{P} \cdot \hat{n}) dS$$

GSHS Physicist's Noble Society(PNS)

물리에 대한 열정을 공유하다

Quantum Mechanics
ver 1.10

과학영재학교 경기과학고등학교
물리올림피아드 학술동아리 PNS 부원
32기 14041 박승원



초판 머리말.

이 책자는 본래 내가 양자역학을 공부하며 뒤엎킨 나의 생각들을 정리하기 위해 만든 것이었다. 하지만 이것이 나의 동료들, 후배들에게도 양자역학을 공부함에 있어서 옆에 두고 쓸 수 있는 좋은 지침서가 될 수 있을 것이라는 생각이 들어, 그에 맞게 D.J.Griffiths의 양자역학 책을 중요한 내용을 골라 연습문제의 형태로 요약한 것이다. 그의 양자역학 책의 연습문제들을 그대로 베낀 일은 전혀 없으며, 때로는 그의 책에서 설명이 부족하다고 생각되는 내용들을 추가하기도 하였다. 필요에 따라서 중요한 것들은 설명 형식으로 책에 소개된 것들을 문제 형식으로 만들었다.

양자역학 공부를 시작하기 전에, 이 책자를 한번 훑어보아라. 그러면 양자역학에서 배울 내용이 무엇인지, 그리고 필요한 수학은 무엇인지 알게 될 것이다. 그리고 양자역학을 배움에 따라, 이 책자의 문제들을 조금씩 풀어보아라. 만약 풀리지 않는다면, 그것은 학문을 배움에 있어서 “무지의 유지” 상태에 이르게 된 것이다. (자신이 모르는 것이 무엇인지조차도 모르는 상태는 정말 최악이다!) 그러면 그것을 “유지”로 바꾸면 되는 것이다. 이것이 바로 이 책자에 담긴 정신이라고 할 수 있다.

때로는 양자역학을 공부하다 보면 정말 의미없어 보이는(!) 복잡한 계산식을 마주치게 된다. 하지만 그것을 빠짐없이 풀어보기를 바란다. (그 대표적인 예로 2단원의 유한 퍼텐셜 우물이 있다.) 그래야만 물리인증제가 되었건, IPhO가 되었건, 실전에서 잘 활용할 수 있게 된다.

초판인 만큼 오류가 많을 것이다. 그런 오류사항들은 언제든지 psw14041@gmail.com 으로 연락해주길 바란다. 책자의 구성에 관한 따끔한 지적도 겸허히(...) 받아들일 것이다.

마지막으로 - 양자역학은 절대로 단 한권의 책으로는 학습할 수 없다. 책마다 양자역학의 기본적인 바탕을 어디에 두는지에 관한 관점이 판이하기 때문이다. 따라서 다른 많은 책들을 함께 활용하길 바란다. 좋은 양자역학 책들의 목록은 다음 사이트에서 볼 수 있다.

<http://above.egloos.com/3522009>

(일부는 쓰인 지 수십년이 넘었지만 아직도 충분히 가치 있다고 평가되는 바이다. 그리고 교육학계가 아닌 정말로 과학계에서 유명한 과학자들이 쓴 책도 있지만, 그것은 그만큼 양자역학이 아직은 이론체계가 확립되지 않아서 그런 것이 아닐까? 하는 생각이 들기도 한다.)

마지막으로 Griffiths의 양자역학 한글 번역본의 역자서문의 다음 문구를 인용하고 싶다.

“나는 이 책을 번역하는 과정에서 자연스럽게 책의 내용을 나의 언어로 다시 정리하는 기회를 가질 수 있었다. 이 책을 읽는 학생들도 비슷한 체험을 하기 바란다.”

(괜히 이 책자 파일을 수정 가능한 hwp파일로 배포한 것이 아니다.)

2015.2.14

경기과학고등학교 32기

물리올림피아드 학술동아리 PNS 일반회원

박승원

$\oint (\vec{P} \cdot \hat{n}) dS$ Quantum Mechanics Expert Ver 1.10 2015.8.9

By 32기 박승원

여러 사람들이여 동난것 사오. 저 장수야 네 물건 그 무엇이라 외치느냐. 사자.
 맑은 단단하고 안은 물렁하며 두 눈은 위로 솟아 하늘을 향하고, 양옆으로 기는 작은 발 여덟 개, 큰 발 두 개,
 맑은 장이 아스스스하는 동난것 사오.
 장수야 하 거북하게 말하지 말고 게것이라 하려르나.
 -작자 미상

0. ψ 를 30번 쓰시오.

1. $t=0$ 일때 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = 1$ 로 규격화되었다.

(1) $\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 0$ 임을 증명하여라.

(2) 이것이 의미하는 바가 무엇인지 서술하시오.

2. $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ 인 정상상태를 생각해 보자.

시간의존 Schrödinger 방정식 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V$ 로부터

(1) 시간무관 Schrödinger 방정식 $\hat{H}\psi = E\psi$ 를 유도하라.

(2) $\sigma_H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = 0$ 임을 보임으로서 E 가 Energy임을 확인하여라.

3. Ehrenfest 정리 $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$ 를 증명하라.

4. 길이가 a 인 무한 퍼텐셜 우물의 n 번째 정상상태 파동함수는

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \text{이다.}$$

(1) 직교성 $\int_0^a \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{nm} = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ 1 & (n = m) \end{cases}$ 을 확인하라.

(2) 초기에 $\psi(x,0)$ 가 주어졌을 때 $\psi(x,t)$ 를 구하는 방법을 설명하시오.

5. 다음의 과정을 통해 조화진동자를 해석적 방법으로 푸시오.

단, 조화진동자에서의 $\hat{H} = p^2/2m + kx^2/2$ 이고, $w \equiv \sqrt{k/m}$.

(※ D.J.Griffiths의 양자역학 책에서는 (3)의 과정을 생략하였다.)

(0) ξ 를 30번 쓰시오.

(1) u 를 해로 갖는 시간무관 Schrödinger 방정식을 써라.

(2)

Let. $y = ax$, $\epsilon \equiv 2E/\hbar w$. a 를 구하고, $\frac{d^2u}{dy^2} + (\epsilon - y^2)u = 0$ 을 유도하시오.

(3)

$y^2 = \xi$ 라 할 때 $\frac{d}{dy}$ 와 $\frac{d^2}{dy^2}$ 을 ξ 로 표현하시오. 이를 이용하여 $y \rightarrow \infty$ 의 조건에서 위의 미

분방정식을 ξ 로 표현하고 그 해를 구하시오.

[해 : $u_0 = e^{\pm y^2/2}$. $y \rightarrow \infty$ 에서 발산하면 안 되므로 $u_0 = e^{-y^2/2}$.]

(4)

$u = h(y)e^{-y^2/2}$ 으로 놓고 이것을 (3)의 미분방정식에 대입하여, $h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m$ 이라는

가정¹⁾을 통해 a_{m+2} 와 a_m 의 관계식을 구하시오. [이를 회귀공식(recursion formula)라고 부른다.]

[Hint. $h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} (\dots)y^m$ 일때 $y \rightarrow \infty$ 일때 $h(y) = 0$ 이므로 각각의 m 에 대해 $(\dots)y^m = 0$ 이다.]

(5) 파동함수가 규격화 가능하기 위해서는 $h(y)$ 의 무한급수가 어느 항에서는 멈추어야 한다. 즉, a_n 은 적당히 큰 n 에 대해서 $a_n = 0$ 을 만족해야 한다. (4)의 식으로부터 가능한 ϵ 을 구하시오. 또한 그를 통해 E 를 구하시오.

(6) 지금까지 한 것을 정리하면 조화진동자의 n 번째 상태의 파동함수는 $\epsilon = 2n + 1$ 일때의

$$u = e^{-y^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m \text{이다.}$$

모든 결과를 종합하여 파동함수를 $\psi_n(x) = A(n)H_n(y)e^{-y^2/2}$ 꼴로 헤르미트 다항식

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2} \text{를 사용해 나타내시오.}$$

단, 계수 a_0 와 a_1 은 규격화하지 말고 그대로 두시오.²⁾

1) “이 방법을 사용하여 미분방정식의 해를 구하는 것을 프로베니우스(Frobenius)의 방법이라고 부른다. 이 방법의 적용 범위 및 조건 등에 관해서는 Boas 혹은 Arfken & Weber의 수리물리 교과서들을 참고하면 될 것이다.” -D.J.Griffiths

2) “여기서는 규격화 상수를 구하려 하지 않겠다. 만일 규격화 상수를 구하는 방법이 궁금하다면, 예를 들어 Leonard Schiff가 지은 Quantum Mechanics, 제3판, Mc-Graw-Hill, New York(1968)을 참조하라.”

-D.J.Griffiths

6. 조화진동자 - 연산자 방법. $a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\mp ip + m\omega x)$.

- (1) ψ 는 \hat{H} 에 대한 고유함수이고 고윳값이 E 이다. 이 때, $a_+\psi$ 와 $a_-\psi$ 또한 \hat{H} 에 대한 고유함수임을 보이고, 각각의 고윳값을 구하시오.
- (2) $a_-\psi = 0$ 의 의미는 무엇인가? 그리고 이것을 통해 $\psi_0(x)$ 를 구하시오.
- (3) $\psi_n(x)$ 를 구하는 식을 쓰시오. 그리고 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ 를 구해보시오.

7. δ 함수 퍼텐셜.

$V = -\alpha\delta(x)$ ($\alpha > 0$)에 질량 m , 에너지 E 인 입자가 입사한다.

- (1) $x = 0$ 에서의 $\frac{d\psi}{dx}$ 의 경계조건 $\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{-\epsilon}^{\epsilon}$ 을 구하시오.

Hint. 시간무관 Schrödinger 방정식을 적분하시오. 그리고 ψ 는 항상 연속이다.

(2)

$E < 0$ 일 경우 입자는 속박된다. $x = 0$ 을 경계로 나뉘는 두 구간에서의 파동함수 $\psi_I(x)$, $\psi_{II}(x)$ 를 구하고, E 를 구하시오. ($\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$ 로 치환하라.)

- (3) $E > 0$ 일 경우 입자는 각각 R , T 의 확률로 반사/투과된다. R , T 를 각각 α , E 로 나타내고, $R + T = 1$ 임을 확인하시오.

8. 유한 퍼텐셜 우물 & 터널링. 당신의 인내심을 시험해 보겠다.

※문제 전체에 대해 $a \equiv \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar, \alpha \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ 로 치환한다.

- (1) 높이가 V_0 인 유한 퍼텐셜 우물에 에너지 E 인 입자가 속박되어 있다. (E 가 무엇인지는 모르지만 우물에 속박될 수 있음을 보장한다. 나중에 구할 것이다.) 세 개의 구간에 대해 $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ 를 적당한 식으로 나타내고, 경계조건 4가지를 쓰시오.
- (2) 이제는 E 를 구할 차례이다. (1)의 연립방정식을 조리있게 다루어 α 를 구하는 방정식을 쓰시오. 그래프의 교점을 통해 구해야만 하는 초월방정식이 나올 것이다. (Hint : a 또한 $a^2 + \alpha^2 = 2mV/\hbar^2$ 를 통해 α 로 나타낼 수 있다.)
- (3) 높이가 V_0 인 퍼텐셜 장벽을 에너지가 E 인 입자가 통과하려 한다. 이번에도 마찬가지로 $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ 를 적당한 식으로 나타내고, 경계조건 4가지를 쓰시오. (이 경우는 E 가 어느 것이어도 되므로 문제가 쉬워진다!)
- (4) $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ 를 a, α, L 로 나타내시오.
- (5) 투과계수 T 와 반사계수 R 을 각각 구하시오. 그리고 $T + R = 1$ 임을 확인하라.

작년에 배웠던 $T \simeq e^{-2aL}$ 이 확인되는가?

- (6) 이번에는 앞서 풀었던 7-(3)과 유사하게, 에너지가 $E > V_0$ 인 입자가 높이가 V_0 인 유한 퍼텐셜 우물을 지나간다. T, R 을 구하고, $T + R = 1$ 을 확인하라.

Hint : 우선 (3)~(5)의 풀이를 연필로 베껴 서라. 그리고 조금만 바꾸면 (6)의 풀이가 되...?

9. Dirac's notation (혹은 Bra/Ket으로 불리기도 함) 을 사용하여,

임의의 관측량 Q 에 대해 $\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$ 임을 증명하라.

(Hint : \hat{H} 는 Hermitian이다. 또한 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ 를 사용하라.)

10. 수소원자(구면좌표계).

(1) 임의의 좌표계에서 기저(basis)가 h_1, h_2, h_3 와 dq_1, dq_2, dq_3 일 때,

$$\vec{\nabla} \psi = \sum_i \hat{q}_i \frac{1}{h_i} \frac{\partial \psi}{\partial q_i}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \sum_i \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\frac{h_1 h_2 h_3}{h_i} \psi_i \right) \text{이다.}$$

이를 이용하여 $\nabla^2 \psi$ 를 구하시오.

(2) 구면좌표계에서의 $\nabla^2 \psi$ 를 r, θ, ϕ 에 대해 쓰시오.

(3) 전자의 파동함수가 $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ 와 같이 파동함수가 각각 r, θ, ϕ 로만 이루어진 함수들의 곱으로 변수분리 된다고 가정하자. 이를

$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ 이 적용된 3차원 시간무관 Schrödinger 방정식에 대입한 후,

(r 에 대한 식) + (θ 에 대한 식) + (ϕ 에 대한 식) = 0 꼴로 정리하시오.

(4) $\Theta(\theta), \Phi(\phi)$ 는 각각 버금르장드르함수 $P_l^m(x)$, $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$ 로 해가 각각 매우 어렵게 / 매우 쉽게 구해진다. 우리가 해야 할 일은 중간 정도로 어려운 $R(r)$ 을 구하는 것이다.

지름 방정식에서 $\rho \equiv \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar}} r, \lambda \equiv \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}$ 로 치환하면 방정식은

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) R + \left[\left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \text{ 이다.}$$

$\rho \rightarrow \infty$ 에서 R 은 어떤 함수로 수렴하는가? [답 : $R \sim e^{-\rho/2}$]

(5) $R = e^{-\rho/2} G$ 로 둔 뒤 G 에 관한 방정식으로 정리하시오.

그리고, $\rho \rightarrow 0$ 에서 $G \sim \rho^s$ 로 근사한 후 s 에 관한 이차방정식을 얻어 s 를 구하시오. [답 : $s = l$]

(6) $G = \rho^l H$ 로 둔 뒤, H 에 관한 방정식을 구하고, $H = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n$ 을 대입하여

a_n 에 관한 회귀공식을 구하시오.

※ 마무리.

이 회귀공식에 의해 계산되는 a_n 은 언젠가는 0이 되어야 한다. 따라서 n 은 적당한 수 n_r 이 되어야 한다. 즉, 회귀공식의 분자가 0이 되므로 λ 는 $n_r + l + 1$ 과 같아야 하고, 이것이 바로 주양자수이다.

그리고 앞서 등장한 H 는 라게르 다항식 $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ 이 된다.

11. $|\vec{L}|$ 을 방정식을 풀지 않고 구하는 방법.

(1) 각운동량 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ 에 대해 $L^2 = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p})$ 를 Levi-Civita symbol ϵ_{ijk} 를 이용하여 전개 및 정리하시오. (* $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$)

(2) (1)의 결과로부터 $|\vec{P}|^2 = (\vec{r}, \vec{p}, \vec{L}$ 에 관한 식)(후에 \vec{L} 을 얻기 위해 일부는 $\vec{r} \times \vec{p}$ 가 아닌 \vec{L} 로 표기해야 한다.)을 얻고, $\vec{p} = i\hbar \vec{\nabla}$ 을 대입해 $\nabla^2 \psi$ 를 얻으시오.

(3) (2)의 결과를 본래 구면좌표계에서의 $\nabla^2 \psi$ 의 정의와 비교하여, $|\vec{L}|^2$ 을 θ, ϕ 에 관한 식으로 나타내시오.

(4) 예전에 변수분리법을 통해 얻어진 방정식은 $|\vec{L}|^2$ 이 적당한 값일 때 (3)의 식과 동일해진다. 그 값을 구하시오.

(*방정식 :
$$\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -l(l+1)$$
)

12. 각운동량 - 연산자 방법.

(1) $[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$ 를 증명하시오. 여기서 i, j, k 는 x, y, z 를 가리킨다.

[Hint : $i\hbar(x_j p_j - x_j p_i)^3$ 까지 유도하라. 이것은 $i\hbar[\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{jl}\delta_{im}]x_j p_m$ 과 같다.]

(2) $[L^2, \vec{L}] = 0$ 을 증명하시오.

(3) $L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y$ 라 하자. 이 때, L^2 과 L_z 에 대해 동시에 고유함수가 되는 f 에 대해, (즉, $L^2 f = \lambda f$, $L_z f = \mu f$.) $L_{\pm} f$ 의 L^2 과 L_z 에 대한 고윳값은?

13. 수소원자의 미세구조 - 상대론적 보정.

(1) 비상대론적인 경우와 비교하여 상대론적인 경우 운동에너지 T 에 추가되는 항, 즉 H_r' 을 p, m, c 로 나타내시오.

(2) p 가 Hermitian임과, (섭동이 없는 상태의) 슈뢰딩거 방정식을 이용하여

3) x_x, x_y, x_z 는 각각 x, y, z 를 가리킨다.

E_r^1 을 E, V, m, c 로 나타내어라.

(3) $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$ 을 이용하여 E_r^1 을 전개, 정리하시오.

단, $\langle \frac{1}{r} \rangle, \langle \frac{1}{r^2} \rangle$ 은 부록 참고. 또한 보어 반경은 $a \equiv 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ 이다.

14. 수소원자의 미세구조 - 스핀-궤도 결합.⁴⁾

(1) 전자의 관점에서 양성자는 전자를 주위로 공전한다. 이 때, 양성자의 공전에 의한 전자 위치에서의 자기장 \vec{B} 를 (?) \vec{L} 꼴로 나타내시오.

(\vec{L} : 양성자의 관점에서 본 전자의 궤도각운동량)

(2) 양성자의 관점에서, 전자의 자기모멘트 $\vec{\mu}$ 를 고전물리학으로 계산하여 (?) \vec{S} 로 나타내시오.

(\vec{S} : 전자의 공전 각운동량)

(3) 상대론적 양자역학을 적용하여 $\vec{\mu}$ 를 구하면 (2)의 2배⁵⁾이다. 이 사실을 토대로 해밀토니안 H 를 구하여라.

(4) 토마스의 세차운동에 의해 H_{so} 는 (3)에서 구한 것의 절반⁶⁾이다.

총 각운동량 $\vec{J} \equiv \vec{L} + \vec{S}$ 를 통해, H_{so} 를 J, L, S 로 나타내어라.

(5) $E_{so}^1 = \langle H_{so} \rangle$ 를 계산하여라. $\langle 1/r^3 \rangle$ 의 값은 부록을 참고하라.

(6) 13-(3)의 E_r^1 과 위 문제의 E_{so}^1 를 더하여, $j = l \pm 1/2$ 임을 사용해 수소원자의 미세구조 에너지 보정량이 다음 식과 같음을 보여라.

$$E_{fs}^1 = \frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{j+1/2} \right)$$

15. 다음 두 식을 이용하여, $s=1/2$ 에 대한 스핀 행렬 S_x, S_y, S_z 를 구하시오.

$$S_z |sm\rangle = m\hbar |sm\rangle$$

$$S_{\pm} |sm\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} \hbar |s(m \pm 1)\rangle$$

능력이 된다면 $s=1$ 에 대한 스핀 행렬 S_x, S_y, S_z 도 구해보시오.

4) 수소원자의 초미세구조의 경우 양성자와 전자의 스핀-스핀 결합까지도 고려한다. 이 경우는 전자의 공전, 즉 궤도와 전자의 스핀에 작용하는 것을 고려하는 것이다.

5) 더 정확히는 전자의 경우 $g_e = 2.002319304361\dots$ 로서 g -factor로 잘 알려져 있으며, 이것은 물리학 역사상 이론과 실험값이 가장 긴 유효숫자까지 일치하는 예이다.

6) 정확히는 $g_e/2$ 가 아닌 $g_e - 1$ 에 의한 수치이다.

부록.

1. Polynomials.

(1) 조화진동자의 해석적 방법 : 헤르미트 다항식 $H_n(x)$.

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2}$$

(2) 수소원자 변수분리법 $R(r)$: 라게르 다항식 $L_{q-p}^p(x)$.

$$L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q), \quad L_{q-p}^p(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x).$$

(3) 수소원자 변수분리법 $\Theta(\theta)$: 버금르장드르함수 $P_l^m(x)$.

$$\text{로드리그 공식 } P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

2. 수소 원자의 전자의 $\langle r^s \rangle$.

(0) 일반적인 계산 방법 : $\langle r^k \rangle = \int_0^\infty (R_{nl})^2 r^{k+2} dr$

$$(1) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

Virial 정리 $2\langle T \rangle = \langle \vec{r} \cdot \nabla V \rangle$ 에서

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}.$$

$\vec{r} \cdot \nabla V = -V$. 따라서 $2\langle T \rangle = \langle -V \rangle$.

여기에서 $\langle T \rangle + \langle V \rangle = E_n$, $\langle V \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$ 이므로

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \langle V \rangle = -\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \cdot 2\langle E_n \rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}. \quad \text{QED.}$$

$$(2) \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l+1/2)} \quad (\text{유도과정 생략. 어려움})$$

$$(3) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \quad (\text{유도과정 생략. 어려움})$$

3. 2015학년도 제 1차⁷⁾ 물리인증제 복기.

1. (25점)

질량이 m 인 입자.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L) \\ \infty & (else) \end{cases}$$

(1) 고윳값, 고유함수 구하시오. (E_n 과 ψ_n 구하라는 뜻)

(2) 바닥상태, 첫 번째 들뜬상태 파동함수를 ψ_1, ψ_2 라 하자.

$\psi(x, 0) = \psi_1 + \psi_2$ 이다.

$\psi(x, t)$ 를 구하시오.

그리고, 입자가 $0 < x < L/2$ 에서 발견될 확률이 가장 큰 시간 T 를 구하고, 그때의 확률을 구하시오.

2. (25점)

두 준위 계. 여기에서 두 준위의 에너지 차이가 작다.

해밀토니안은 $H = \begin{pmatrix} -E_0 - A & \\ & -A - E_0 \end{pmatrix}$ 은 나타내어진다.

(1) 고윳값, 고유벡터 구하시오.

(2) 두 상태 $|1\rangle, |2\rangle$ 를 생각하자.

$t=0$ 에서 상태 $|1\rangle$ 이다. $t=T$ 에서 관측할 때 $|2\rangle$ 일 확률은?

(3) $t=0$ 일때 $|2\rangle$ 이다. $t=T$ 에서 관측할 때 $|2\rangle$ 일 확률은?

3. (25점)

해밀토니안은 $H = \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ 이다. (μ_B 는 보어 마그네톤)

$t=0$ 일때의 기저(basis)는 $|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 이다.

(1) $t=0$ 일때 자기장 $\vec{B} = B\hat{y}$ 를 켜다.

$t=T$ 일때 s_z 가 $1/2$ 일 확률은?

(2) 이 상태에서 $t=T$ 일때 $\vec{B} = B\hat{x}$ 를 켜다. $t=2T$ 일때 s_z 가 $1/2$ 일 확률은?

(3) $t=T$ 일때 $s_z = 1/2$ 가 측정되었다. $t=2T$ 일때 s_z 가 $1/2$ 일 확률은?

4. (25점)

두 전자의 파동함수가 $a\chi_+ + b\chi_-$, $c\chi_+ + d\chi_-$ 이다. (단, a, b, c, d 는 실수이다.)

(χ_{\pm} 는 각각 스핀 $\pm 1/2$ 을 나타낸다.)

이 두 전자로 이루어진 계를 생각해 보자.

(1) 전체 스핀이 삼중항($s=1$)일 확률은?

(2) 전체 스핀이 단일항($s=0$)인 경우, 한 전자의 s_y 가 $1/2$ 로 측정되었을 때 다른 전

자의 s_x 가 1/2로 측정될 확률은?

※ 후기.

필자는 이번에 양자역학 Expert에 처음 응시하였다. 공부할 때는 D.J.Griffiths의 양자역학 책의 1,2,3,4,6,7,8장을 공부하였으나 이번 시험에서는 “확률”이라는 국소적인 부분에서 심도있는 문제들이 몇 개 출제되었다.

1번문제는 양자역학을 많이 공부하지 않았어도 풀 수 있는 무한 퍼텐셜 우물 관련 문제였다. Griffiths의 양자역학 책에도 유사한 문제가 있으며, 종전에 나왔던 기출문제와 매우 유사하였다.

2번문제 또한 종전에 나왔던 기출문제와 매우 유사하였다.

3번문제는 스핀에 관련된 문제로, Griffiths 의 문제 4.33 과 상당히 흡사하였다. 필자는 이것을 시간의존 섭동론으로 풀고 나왔었다(...)

4번문제 역시 스핀에 관련된 문제로, 단일항이나 삼중항이라는 용어는 Griffiths 5단원을 읽어보았다면 접해보았을 것이었다.

※출제 범위에 관한 논쟁(?)

Griffiths 양자역학 책 기준으로, 2,3,4,6단원 위주로 나오며, 가끔씩 7단원(변분원리) 나 8단원(WKB근사), 9단원(시간의존섭동론) 도 출제된다는 이야기가 있다. 5단원은 열빛통계에 나와야 할 부분 같지만 페르미온/보존 관련한 계산문제가 2014학년도 3차 때 출제되었다 하니 이 부분도 한번 읽어보는 것이 좋다.

4. 전해져 내려오는 기출문제들.

1. 질량 m , 전하량 q 인 스핀 1/2입자가 무한 2차원 퍼텐셜 우물에 갇혀 있다.

(1) 이 입자의 고유함수와 그의 고윳값을 구하여라.

(2) 여기에 스핀 1/2인 입자 한 개를 더 넣었다. 두 입자 사이의 상호작용은 $V = \alpha \vec{S} \cdot \vec{B}$ 로 주어지고 \hat{z} 방향의 자기장을 걸어주었을 때 에너지의 1차 섭동과 2차 섭동 항을 구하여라.

2. Dirac Delta 함수 potential에 입자 e^{ikx} 가 입사할 때 경계조건, T , R , 입사파와 반사파 · 투과파 사이의 위상차 δ_R, δ_T 의 tan값을 구하는 문제.

3. 전자의 위치를 나타내는 파동함수가 $Y(\theta, \phi) = A \sin\theta \cos\phi$ 로 주어질 때

(1) 규격화상수 A 구하기

(2) 파동함수를 L_z 의 고유 상태들의 일차결합으로 나타내고 각각의 상태가 될 확률을 구하기.⁸⁾

(3) $\langle L^2 \rangle, \langle L_x \rangle, \langle L_y \rangle, \langle L_z \rangle$

4. 계의 상태 벡터가 $|a\rangle$ 이다. 이 계가 상태 $|b\rangle$ 로 될 확률은?

답 : $|\langle ab \rangle|^2$. 문제가 이렇게 전해 내려오나 이것만으로 20점을 주지는 않았을 것이다.

5. 2015학년도 제 3차 물리인증제 복기

1. (25점) 스핀이 없는 입자의 파동함수가 다음과 같다.

$$\psi(x, y, z) = A(x + y + z)e^{-\alpha r}$$

(1) L 의 총합은?

(2) $\langle L_z \rangle = ?$

(3) L_z 를 측정한 결과 \hbar 가 나올 확률은?

단, 구면조화함수들은 다음과 같다.

$$L_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad L_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta,$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}$$

2. (25점) $V = \frac{1}{2}kr^2$ 의 퍼텐셜에 속박되어 있는 질량 m , 전하량 q 인 입자를 고려하자.

여기에 전기장 $\vec{E} = E\hat{x}$ 를 가한다.

(1) 에너지 고유치 = ?

(2) 이 계의 쌍극자모멘트를 구하여라. 단, 쌍극자모멘트는 $p = q\langle x \rangle$ 와 같이 구할 수 있다.

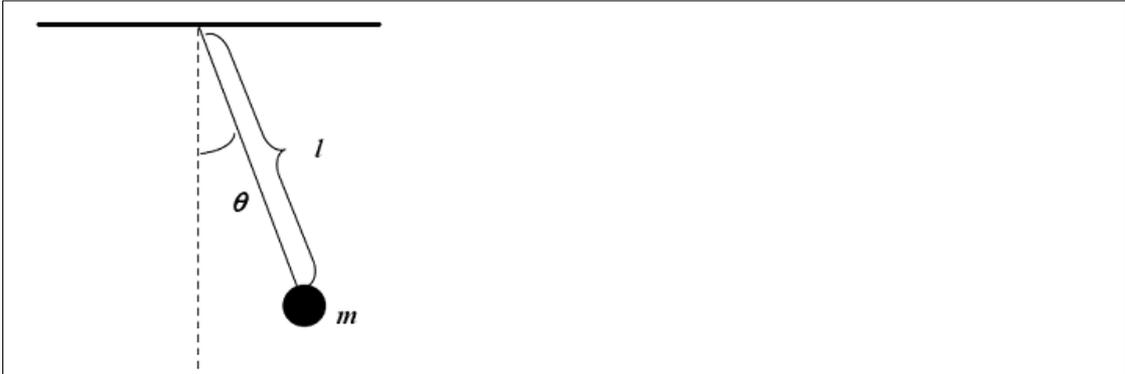
3. (25점) 다음 그림과 같이 길이 l 인 줄에 달린 질량 m 인 물체로 구성된 단진자를 양자역학적으로 해석하자.

(1) 진폭이 작은 경우 $\cos\theta \simeq 1 - \frac{\theta^2}{2}$ 로 근사할 수 있다. 이 때, 에너지 고유치 = ?

(2) 진폭이 충분히 작지 않을 경우 $\cos\theta \simeq 1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{24}$ 로 계산해야 하며, 이 경우의 에너지 고유치를 구할 때 원래와의 차이값을 바닥상태에 대해 섭동 일차항까지 고려하여

계산하시오. 단, 1차원 조화진동자 바닥상태 고유함수는 $\psi_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-\alpha^2 x^2/2}$ 이다.

8) 문제 순서가 (2)→(1)로 되어 있어야 Y 가 Y_1^1, Y_1^{-1} 의 일차결합으로 나타내어짐을 일찍 알 수 있지 않았나 싶다.



4. (25점) xy 평면상에서 회전하는 회전관성 I 의 강체를 고려하자.

- (1) 고유함수 ψ_m , 고유치 에너지값 E_m 을 구하시오.
- (2) 입자의 파동함수가 $\Psi(\phi) = A \cos \phi$ 와 같이 주어질 때, 이 입자를 관측할 경우 $\psi_{m=1}$ 상태에 있는 것으로 관측될 확률은?
- (3) 입자가 $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{2}$ 에 있을 확률은?

※ 후기.

이번 인증제는 정말로 양자역학답게(?) 출제되었다. 구면조화함수, 변수분리미방(+ 조화진동자), 간단한 섭동론(+ 조화진동자), 그리고 고유함수와 고윳값 구하기 이렇게 양자역학에서 가장 fundamental하다 할 수 있는 것들이 어렵지 않은 범위에서 모두 출제되었다. (그래서...마음에 들었다 ㅎㅎ ^o^)

1번문제는 $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, $z = r \cos \theta$ 로 바꾸어 주어진 ψ 를 구면조화함수들의 일차결합으로 나타내면 된다. 기억에 의하면 $\psi = a Y_1^1 + b Y_1^{-1} + c Y_1^0$ 이라 할 때 $|a|^2 : |b|^2 : |c|^2 = 1 : 1 : 9$ 였으며, $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$, $L_z = m \hbar$ 로 구하면 된다.

문제 초반에 “스핀이 없는” 이라는 조건을 왜 주었는지 모르겠다. 추가바람.

2번문제는 새로운 퍼텐셜 $V = \frac{1}{2} k(x^2 + y^2 + z^2) - qEx$ 에 대하여 슈뢰딩거 방정식을 풀어야 하는데, 이는 $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ 로 변수분리 했을 때 각각 조화진동자 슈뢰딩거 방정식으로 풀린다. 특히 $X(x)$ 를 구할 때는 $x' \equiv x - \frac{qE}{k}$ 로 치환해야 한다.

변수분리 미분방정식을 조화진동자에 접목시킨 참신한 문제였다. 변수분리 미방 풀이문제를 낼 경우 이 책자에서 살펴보았던 수소원자 $\psi = R\Theta\Phi$ 로 구면좌표계 변수분리하는 것을 내기는 힘들 것이며, 이렇게 $\psi = XYZ$ 로 직교좌표계 변수분리하는 것으로 출제될 것이므로 이 문제는 특히 잘 익혀두자.

3번문제는 (1)은 풀이생략, (2)는 1차 섭동항이 $E^1 = \langle \psi^0 | H | \psi^0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_0)^* H \psi_0 dx$

임을 알았으면 쉽게 풀 수 있었다. Gaussian Integral $\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$ 을 알아야 함은 덤이다.
 4번문제는 경계조건 $\psi(\phi+2\pi)=\psi(\phi)$ 만 생각해내면 역시 쉽게 해결 가능하였다.
 보다시피 이번 시험은 필자가 완벽하게 답지를 만들 수 있는 최초의 시험이었다. ;;

6. 시험 직전 공식암기집

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi, \quad \Psi = \psi e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$
 무한퍼텐셜우물 $E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$

조화진동자 $V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ 에 대해

$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\mp ip + m\omega x)$ $H = \hbar\omega \left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right)$	$a_- \psi_0 = 0$ $a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}$ $a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$
---	--

파울리 스핀 행렬

$$\vec{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

섭동론 이것만은 알고가자

일차근사 에너지 $E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H | \psi_n^0 \rangle$, 이차근사 에너지 $E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$

겹침이 있을 경우 : 일단 E^1 계산. $W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H | \psi_j^0 \rangle$.
 W 행렬 고유치 w 에 대해 $E(\lambda) = E_1^0 + \lambda w E^1$. 모르겠으면 예제 6.2 보기.