원자에서 전자운동 - 고전양자론

강 대현(Daehyeon Kang)
samplemoon@korea.kr

요약

고전양자론으로 수소원자의 S 오비탈에서 전자운동이 어떤 모습인지 보여주고자 한다.
S 오비탈은 각운동량이 없는 경우로 슈뢰딩거방정식에서 당연한 것이나 고전양자론으로 설명하기 어려운 부분이다. 고전양자론은 양자역학이 번성한 지금도 여전히 유효하다.

1. 서문

1910년대에 조머펠트는 수소원자의 에너지준위를 특수상대성이론과 양자조건을 가지고 설명하였다. 그의 연구내용을 보면 수소원자에서 전자의 궤도각운동량이 있어야 원자가 유지되는 것으로 나타난다. 각운동량이 없으면 허수의 에너지 준위를 갖게되어 무의미한 상황이 벌어진다.
디랙방정식에서 얻어진 공식도 이상하게 조머펠트공식과 일치하는 결과를 보여준다.
그래서인지는 몰라도 학자들은 보통 고전양자론으로 슈뢰딩거방정식에서 나오는 1s,2s,3s 와 같은 각운동량이 없는 경우 설명할 수 없다고 보는 것 같다.

처음 닐스보어는 궤도각운동량을 $p = \frac{n\hbar}{r}$ 로 사용했다. 전자의 운동량에 원자핵과 전자사이의 거리를 곱해 플랑크상수를 2파이로 나눈 값에 정수배로 놓았다.
역학적에너지는 아래와 같이 운동에너지에 쿨롱포텐셜에너지를 더해 만든다.

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \qquad (1)$$

그리고 원심력과 쿨롱인력이 같다는 조건을 $\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$ 붙인다음 간단한 계산을 하여

$$E = -\frac{1}{2}\frac{me^4}{n^2\hbar^2} \qquad (2)$$

(2)식을 이끌어내고 이것으로 수소원자의 스펙트럼 선 문제를 해결하는데 성공한다.

이어서, 아놀드 조머펠트는 보어의 양자조건 $p_{\varnothing} = \frac{n_{\varnothing}\hbar}{r}$ 을 각운동량으로 부여하고 추가로

$\int p_r dr = n_r h$ 라는 조건을 부여하여 상대론적 관점에서 수소원자의 에너지준위를 설명할 수 있는 이른바 조머펠트공식을 만들어내게 되는데 미세구조를 설명하는 등 꽤 성공적이라는 평을 받았다. 그런데 이 공식에서 각운동량이 없는 상황은 다루지 못했다. 우리가 일상에서 .지표면에 수직으로 던진 물체는 어느정도 올라갔다가 다시 떨어지는 현상을 수 없이 보아 온 터라 이걸 고전양자론이 다룰수 있어야 한다. 수소원자에서 각운동량이 없을 때 전자는 곧바로 원자핵을 향해 돌진하다가 핵 근처에서 되돌아와야 하는 거 아닌가한다.

2. 주 문

필자는 위에서 말한 수소원자에서 전자의 각운동량이 없는 수직운동 기술하고자 간단하게 비상대론적 역학을 사용하고자 한다.

원자핵과 전자 각각 1개가 있는 원자(수소원자)라면 역학적 에너지는 이러하다.

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \tag{3}$$

조머펠트가 부여한 양자조건은

$$\int p_r dr = n_r h \tag{4}$$

인데 잘 알려진 것처럼 아래와 같이 표시된다.

$$\int p_r dr = \sqrt{2m(E + \frac{e^2}{r}) - \frac{(n_\varnothing \hbar)^2}{r^2}}\, dr = n_r h \tag{5}$$

(5)식을 보면 각운동량이 없을 때 나타나는 문제점이 전자와 원자핵이 가장 멀리있을 때 거리는 알 수 있지만 가장 가까운 거리를 알 수가 없다는 점이다. 주기적 타원운동인 경우

있어야하는데 없다는 것이다. 이리저리 궁리하다가 방정식을 변형하였다.

$$\int p_r dr = \int \frac{\sqrt{2mEr^2 + 2me^2 r - (n_\varnothing \hbar)^2}}{r}\, dr = n_r h \qquad (6)$$

위와같이 하면 아까 말한 문제점이 사라진다. 각운동량이 없을 때 계산이 가능해진 것이다.

적분표

$$\int \frac{\sqrt{ax^2+bx+c}}{x} dx = (\sqrt{ax^2+bx+c}) + \frac{b}{2} \cdot \frac{-1}{\sqrt{-a}} \sin^{-1}(\frac{2ax+b}{\sqrt{b^2-4ac}}) + \frac{c}{\sqrt{-c}} \sin^{-1}(\frac{bx+2c}{x\sqrt{b^2-4ac}})$$

위의 널리 알려진 적분표를 활용하여 결과를 내보면 이러하다.

$$E = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{(n_r + n_\varnothing)^2 \hbar^2} \qquad (7)$$

여기서 $n_r = 1,2,3,4..........., n_\varnothing = 0,1,2,3,4.....$

예를들어 수소원자의 바닥상태(1S)는 $n_r = 1, n_\varnothing = 0,$

수소원자의 들뜬상태(2S)는 $n_r = 2, n_\varnothing = 0,$

수소원자의 들뜬상태(2P)는 $n_r = 1, n_\varnothing = 1,$ 이다.

3. 결론

원자의 S오비탈 상태에서 전자는 원자핵에 닿았다가 일정거리까지 멀어지는 운동을 반복하고 있음을 보여준다. 이런 운동이 슈뢰딩거방정식에선 파동함수로 나타나는데 원자핵에 가까워지면 속력이 빨라져 발견될 확률이 낮아지고 가장 먼거리에서 속력이 아주 낮아 전자를 찾을 확률이 높다.

그리하여 수소원자의 바닥상태에선 둥근 공모양이라고 이해를 하면 되겠다.

그렇다면 아놀드 조머펠트가 오래전에 해보았던 상대론적 역학에너지를 사용하는 경우

각운동량이 없으면 에너지 준위가 허수가 되어 무의미해지는 데........

이런 경우는 어떻게 해야 하는가 하는 의문이 남게 되는 것이다.

각운동량이 있어야 되는 게 정상일까....이른바 상대론적 슈뢰딩거방정식을 풀어보면 역시나

1s 상태는 각운동량이 없는 것으로 되어있다.

이런 문제도 고전양자론으로 어렵겠지만 풀어나가야하는 상황인 것이다.

참고문헌

[1] PerterG.Bergmann, Introduction to thetheory of Relatvity. (Dover publication 1976), -도서
[2] P.A.M. DIRAC, the Principles of Quantum Macanics 4th ed. (OXFORD AT THE CLAREN 1967), -도서
[3]Gasiorowicz “quantum physics” johnwiely&sons inc 1974, -도서

Electron Motion in Atoms-Classical Quantum Theory

Daehyeon Kang

Abstract
We attempts to show what electron motion looks like in the S orbital of hydrogen atoms. by Classical quantum theory
S-orbital is the case without angular momentum, which is natural in Schrödinger's equation but difficult to explain in classical quantum theory. Classical quantum theory is still valid even now, when quantum mechanics flourished.