

39장: 물질파 심화

More About Matter Waves

이번 장에서 배울 내용

38장에서 전자가 **물질파(matter wave)** 로 행동한다는 것을 배웠다. 이번 장에서는 물질파를 좁은 공간에 **가두면** 무슨 일이 일어나는지 살펴본다.

- 전자를 1차원 우물에 가두면 → 에너지가 **양자화(quantization)** 된다
- 갇힌 전자의 **파동함수(wave function)** 와 발견 확률
- 현실적인 **유한 우물(finite well)**, 2차원·3차원 트랩
- 자연이 만든 전자 트랩: **수소 원자(hydrogen atom)**

20세기 초의 가장 큰 수수께끼 — "원자는 왜 무너지지 않고, 왜 특정한 색의 빛만 내는가?" — 를 이번 장에서 풀게 된다.

실생활 속 갇힌 전자: QLED TV

QLED TV의 'Q'는 **양자점(quantum dot)** 이다. 지름 수 나노미터짜리 반도체 알갱이 속에 전자가 갇혀 있다.



같은 물질인데도 **알갱이의 크기만 바꾸면 색이 바뀐다**. 자외선을 비추면 작은 알갱이는 파란빛, 큰 알갱이는 붉은빛을 낸다. 왜 그럴까? 이번 강의 핵심 공식 하나로 설명된다.

(사진: eFluor nanocrystals under UV, Travis Jennings, Wikimedia Commons, CC BY 3.0)

이번 장의 핵심 아이디어

구속 원리(confinement principle) :

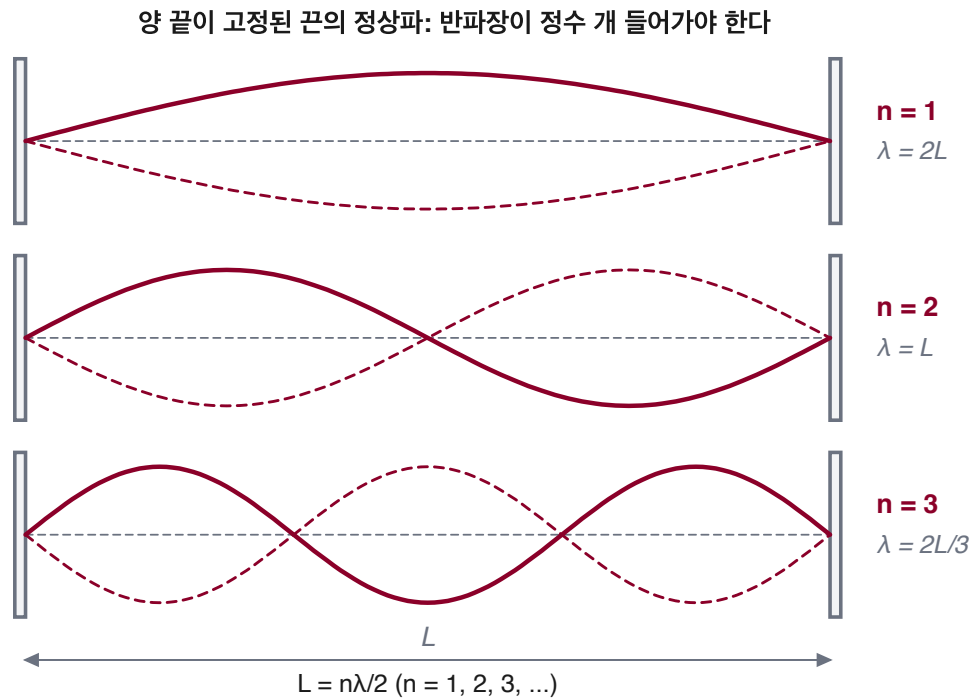
파동을 유한한 영역에 가두면 **양자화** 된다 — 즉, 불연속적인 상태들만 허용되고 각 상태는 정해진 에너지를 갖는다.

- 끈에 묶인 파동이든, 전자의 물질파든 **모든 파동**에 적용된다
- 갇힌 전자는 아무 에너지나 가질 수 없고, **에너지 준위(energy level)** 위에만 있을 수 있다
- 준위 사이를 오갈 때 빛(광자)을 흡수하거나 방출한다

39.1 갇힌 전자의 에너지

끈의 정상파 복습 (16장)

무한히 긴 끈에는 어떤 진동수의 **진행파(traveling wave)** 든 만들 수 있다. 그러나 길이 L 인 끈의 양 끝을 고정하면 **정상파(standing wave)** 만 가능하다.



양 끝이 **마디(node)** 가 되어야 하므로, 반파장이 정수 개 들어가야 한다:

$$L = n \frac{\lambda}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

양자수

허용된 각 정상파 상태의 변위는

$$y_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

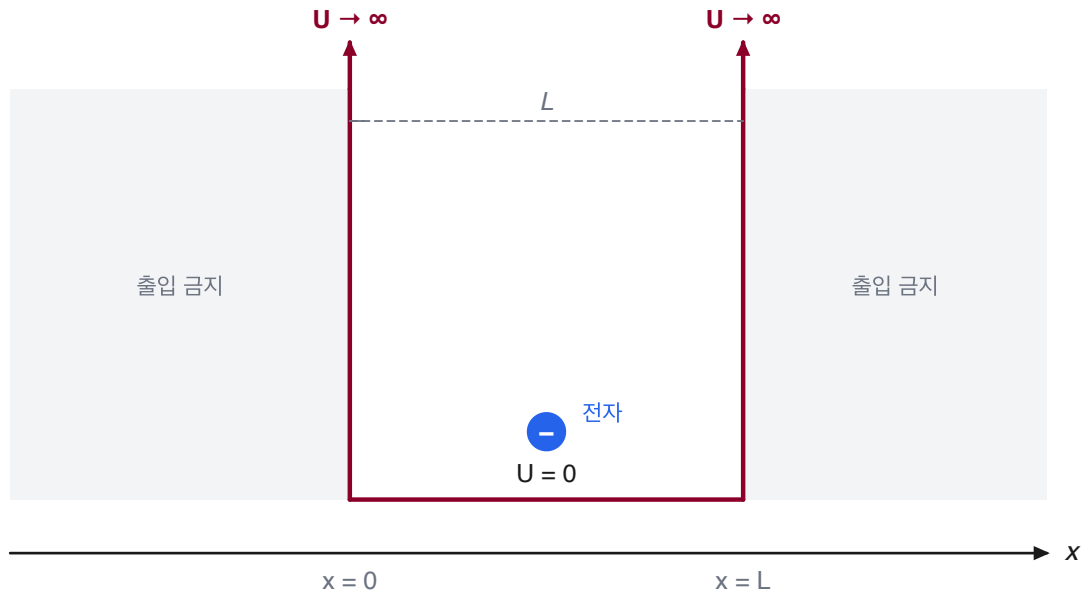
- 정수 n 이 상태를 구분한다 $\rightarrow n$ 을 **양자수(quantum number)**라 부른다
- 파동을 가두는 순간, 연속적이던 진동수가 **불연속적**으로 바뀐다

물질파도 파동이다. 따라서 **전자를 가두면 전자의 에너지도 양자화** 되어야 한다. 이것이 이번 장 전체를 관통하는 논리이다.

1차원 전자 트랩: 무한 퍼텐셜 우물

전자를 x 축 위 길이 L 구간에 가두는 가장 단순한 모형:

무한 퍼텐셜 우물: $0 < x < L$ 에서만 $U = 0$, 밖은 $U \rightarrow \infty$



- $0 < x < L$ 에서 퍼텐셜 에너지 $U = 0$
- $x < 0, x > L$ 에서 $U \rightarrow \infty$ (절대 넘을 수 없는 벽)

이를 **무한 퍼텐셜 우물(infinite potential well)** 이라 한다. 이상화된 모형이지만, 실제로 실험실에서는 전자 하나를 트랩에 가둬 몇 달씩 보관하며 정밀 측정을 하기도 한다.

갇힌 전자의 드브로이 파장

우물 벽에서 전자의 물질파는 **마디**가 되어야 한다. 끈의 정상파와 똑같이:

$$\lambda = \frac{2L}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

이 λ 를 **드브로이 파장(de Broglie wavelength)**으로 해석한다. 비상대론적 전자는 $K = p^2/2m$ 이고, 우물 안에서 $U = 0$ 이므로 전체 에너지는 $E = K$:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

이 두 식을 결합하면 허용되는 에너지가 나온다.

에너지 준위 유도

정상파 조건에서 운동량이 양자화된다:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L/n} = \frac{nh}{2L}$$

이를 $E = p^2/2m$ 에 대입하면:

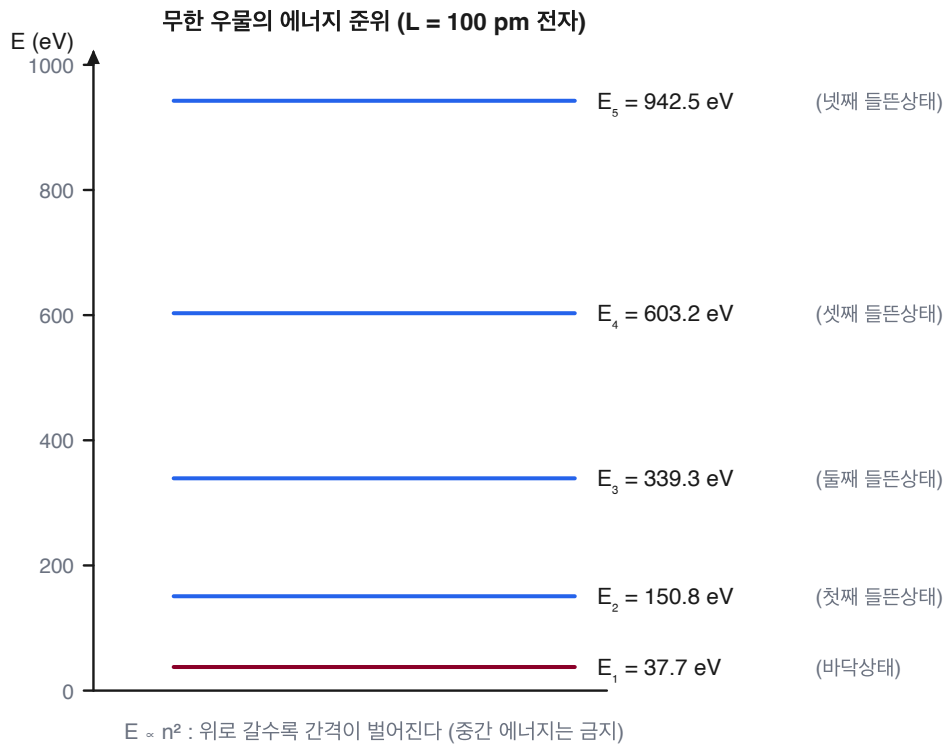
$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{nh}{2L} \right)^2 = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

전자는 이 값들 **사이의 에너지는 절대 가질 수 없다**. $n = 1$ 과 $n = 2$ 의 중간쯤 되는 에너지는 허용되지 않는다.

에너지 준위 다이어그램

$L = 100 \text{ pm}$ (원자 크기 정도)인 우물의 허용 에너지:



- $n = 1$: **바닥상태(ground state)** — 전자가 가장 선호하는 상태
- $n \geq 2$: **들뜬상태(excited state)** — $n = 2$ 가 첫째 들뜬상태
- 에너지가 n^2 에 비례하므로 위로 갈수록 준위 간격이 **벌어진다**

예제 1: 가장 작은 에너지

$L = 100 \text{ pm}$ 인 무한 우물에 갇힌 전자가 가질 수 있는 최소 에너지는?

먼저 공통 인수 $h^2/8mL^2$ 를 계산한다:

$$\frac{h^2}{8mL^2} = \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{8 (9.11 \times 10^{-31} \text{ kg})(100 \times 10^{-12} \text{ m})^2}$$

분자는 4.40×10^{-67} , 분모는 7.29×10^{-50} 이므로:

$$\frac{h^2}{8mL^2} = 6.03 \times 10^{-18} \text{ J}$$

최소 에너지는 $n = 1$ 일 때이므로:

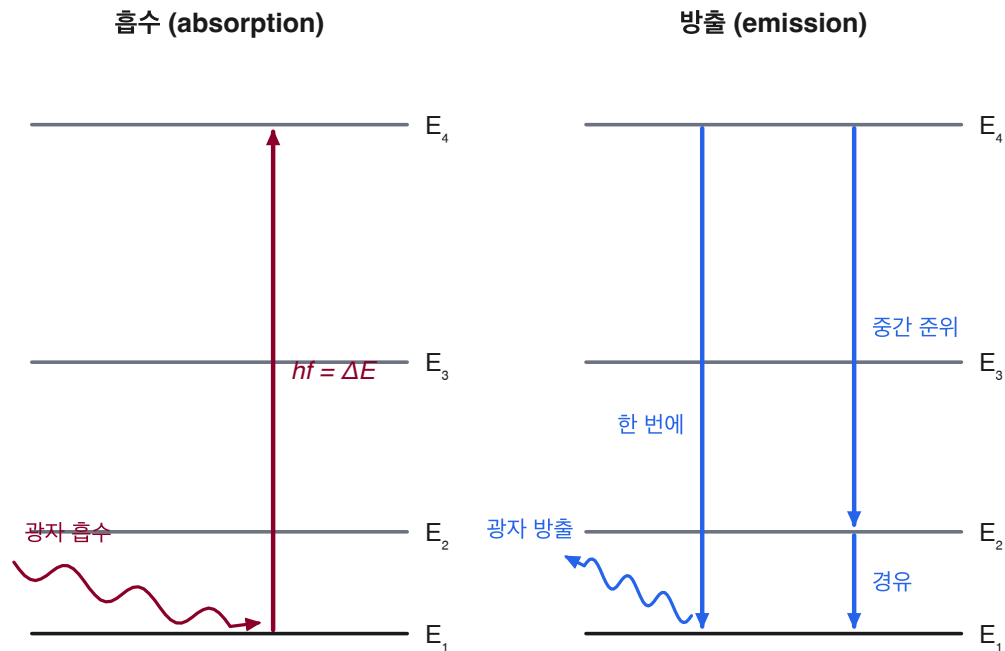
$$E_1 = (6.03 \times 10^{-18} \text{ J})(1^2) \approx \boxed{37.7 \text{ eV}}$$

갇힌 전자는 **에너지 0으로 가만히 있을 수 없다!**

에너지 변화: 양자 도약

전자는 준위에서 준위로만 이동할 수 있다. 이를 **양자 도약(quantum jump)** 또는 전이(transition)라 한다.

$$\Delta E = E_{\text{high}} - E_{\text{low}}$$



전자는 준위 사이만 이동한다: $hf = hc/\lambda = \Delta E$

- 올라가려면 외부에서 정확히 ΔE 만큼 에너지를 받아야 한다
- 들뜬 전자는 오래 머물지 않고 곧 **탈들뜸(de-excite)** 하여 내려온다
- 내려오는 경로는 여러 가지 — 한 번에 점프하거나, 중간 준위를 거친다

광자의 흡수와 방출

전자가 빛으로 에너지를 주고받을 때, **광자(photon)** 한 개의 에너지가 정확히 준위 차와 같아야 한다:

$$hf = \frac{hc}{\lambda} = \Delta E = E_{\text{high}} - E_{\text{low}}$$

- **흡수(absorption)** : 광자를 삼키고 위 준위로 점프
- **방출(emission)** : 광자를 내놓고 아래 준위로 점프
- 광자 에너지가 어떤 ΔE 와도 맞지 않으면 흡수 자체가 **불가능**

따라서 갇힌 전자가 주고받는 빛은 **특정 파장들만** 가능하다. 이것이 스펙트럼선의 기원이다.

예제 2: 양자 도약과 광자 파장

$L = 100$ pm 우물의 전자가 바닥상태($n = 1$)에서 둘째 들뜬상태($n = 3$)로 점프하려면?

$$\Delta E_{31} = \frac{h^2}{8mL^2}(3^2 - 1^2) = (6.03 \times 10^{-18} \text{ J})(8) = 4.83 \times 10^{-17} \text{ J} \approx 301 \text{ eV}$$

이 에너지를 빛으로 흡수한다면 파장은:

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E_{31}} = \frac{(6.63 \times 10^{-34})(3.00 \times 10^8)}{4.83 \times 10^{-17}} = \boxed{4.12 \times 10^{-9} \text{ m} = 4.12 \text{ nm}}$$

내려올 때는 $3 \rightarrow 1$ (4.12 nm), $3 \rightarrow 2$ (6.60 nm), $2 \rightarrow 1$ (11.0 nm)의 세 가지 방출이 가능하다.

39.2 갇힌 전자의 파동함수

파동함수

슈뢰딩거 방정식을 무한 우물에 대해 풀고, 벽에서 파동함수가 0이어야 한다는 경계 조건을 적용하면:

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (0 \leq x \leq L)$$

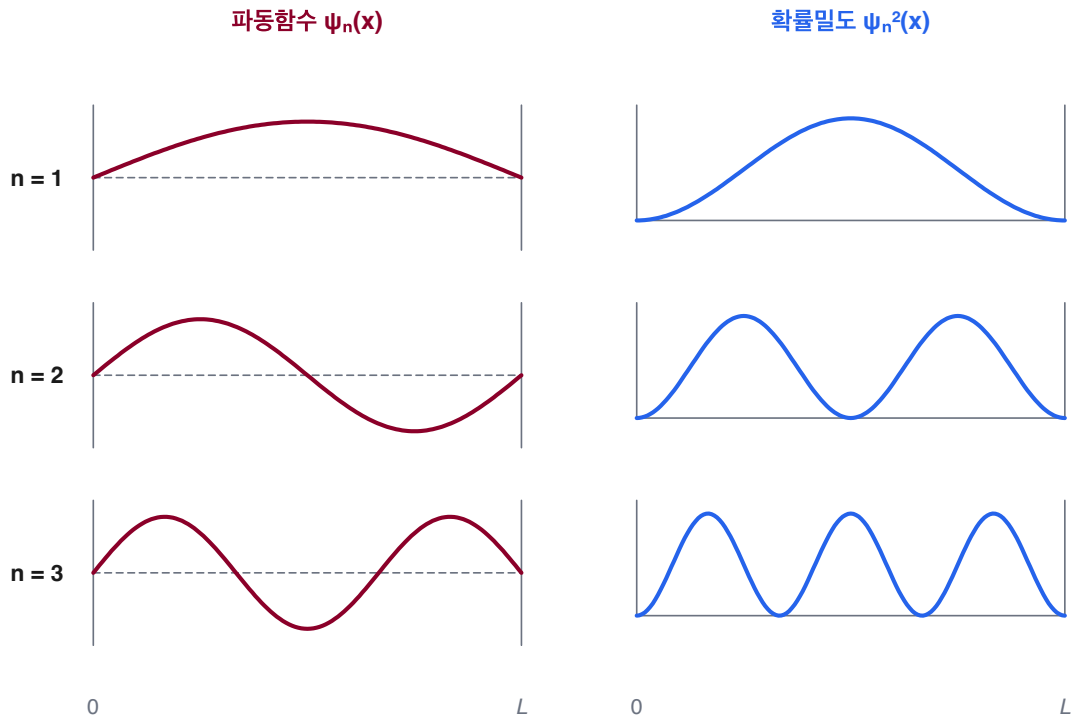
- 우물 밖에서는 $\psi_n = 0$ (전자가 절대 나갈 수 없다)
- 끈의 정상파 $y_n(x)$ 와 **완전히 같은 꼴** — 갇힌 전자는 "정상 물질파"이다
- 진폭 A 는 잠시 후 **규격화(normalization)** 로 결정한다

확률밀도

$\psi_n(x)$ 자체는 측정할 수 없다. 물리적 의미를 갖는 것은 **확률밀도(probability density)** $\psi_n^2(x)$ 이다:

$$p(x) = \psi_n^2(x) dx = A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx$$

- $\psi_n^2(x) dx$ = 위치 x 주변 폭 dx 에서 전자가 **검출될 확률**
- 구간 $x_1 \sim x_2$ 에서 발견될 확률은 $\int_{x_1}^{x_2} \psi_n^2 dx$



고전물리와 다른 점

고전적인 입자라면 우물 안 **어디서나 같은 확률** 로 발견되어야 한다. 그러나 양자역학의 답은 다르다.

$n = 2$ 상태를 보자:

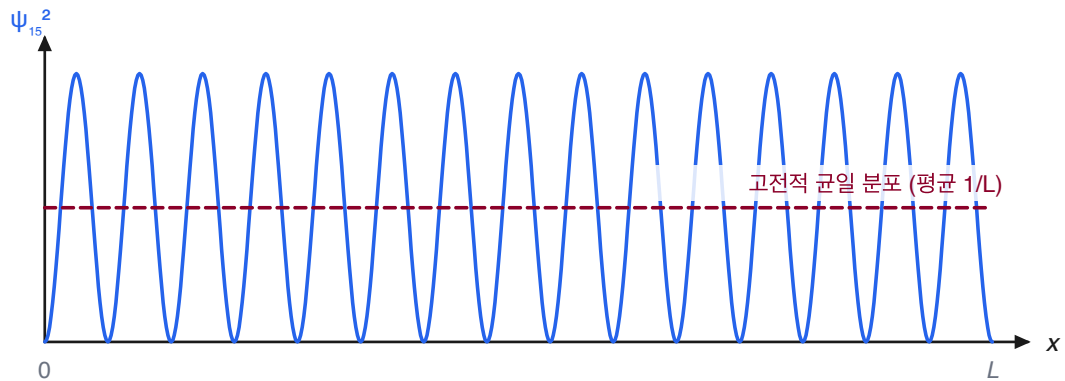
- $x = L/4, 3L/4$ 에서 발견 확률 **최대**
- $x = 0, L/2, L$ 에서는 발견 확률이 **거의 0**

우물 한가운데($L/2$)에 검출기를 놓으면 $n = 2$ 전자는 거의 안 잡힌다. 입자라는 직관으로는 도저히 이해할 수 없고, **파동** 으로만 설명된다.

대응 원리

n 이 커지면 어떻게 될까? $n = 15$ 의 확률밀도:

$n = 15$ 의 확률밀도: 거의 균일 $\rightarrow$ 고전물리와 연결 (대응 원리)



봉우리가 촘촘해져 실질적으로 **균일한 분포** 처럼 보인다 — 고전물리의 예측과 같아진다.

대응 원리(correspondence principle) : 충분히 큰 양자수에서 양자물리의 예측은 고전물리의 예측과 부드럽게 이어진다. (닐스 보어)

규격화 — 진폭 A 결정하기

전자는 우물 안 **어딘가에는 반드시** 있으므로, 전 구간 확률의 합은 1이다:

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

변수를 $y = n\pi x/L$ 로 치환하면 $dx = (L/n\pi) dy$ 이고, 적분 구간은 $0 \rightarrow n\pi$:

$$A^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 y dy = A^2 \frac{L}{n\pi} \left[\frac{y}{2} - \frac{\sin 2y}{4} \right]_0^{n\pi} = A^2 \frac{L}{n\pi} \cdot \frac{n\pi}{2} = A^2 \frac{L}{2}$$

$A^2 L/2 = 1$ 에서 $A = \sqrt{2/L}$. 따라서:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}$$

영점 에너지

왜 $n = 0$ 은 안 될까? $n = 0$ 을 넣으면 모든 x 에서 $\psi_0(x) = 0$ — 우물 안에 전자가 **없다**는 뜻이 되어 모순이다.

- 허용되는 최소 에너지는 $E_1 = h^2/8mL^2 > 0$
- 이를 **영점 에너지(zero-point energy)**라 한다
- **갇힌 입자는 결코 정지할 수 없다** — 절대영도에서도!

$L \rightarrow \infty$ 로 우물을 넓히면 $E_1 \rightarrow 0$. 하지만 그러면 더 이상 갇힌 입자가 아니라 자유 입자가 된다. 구속이 있는 한 영점 에너지는 0이 될 수 없다.

예제 3: 왼쪽 1/3에서 발견될 확률

$L = 100$ pm 우물의 바닥상태 전자를 왼쪽 1/3 구간($0 \leq x \leq L/3$)에서 발견할 확률은?

$$P = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx$$

$y = \pi x/L$ 로 치환하면 구간은 $0 \rightarrow \pi/3$:

$$P = \frac{2}{\pi} \left[\frac{y}{2} - \frac{\sin 2y}{4} \right]_0^{\pi/3} = \frac{2}{\pi} \left(\frac{\pi}{6} - \frac{\sin(2\pi/3)}{4} \right) = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \approx \boxed{0.20}$$

대칭성에 의해 오른쪽 1/3도 0.20이므로, 가운데 1/3에서 발견될 확률은 $1 - 0.20 - 0.20 = 0.60$. 바닥상태 전자는 **가운데에 몰려 있다**.

시뮬레이션: 무한 퍼텐셜 우물 — 양자수 n 과 우물 폭 L 에 따른 ψ_n , $|\psi_n|^2$, 에너지 준위와 광자 방출·흡수

39.3 유한 우물 속 전자

현실적인 우물: 깊이가 유한하다

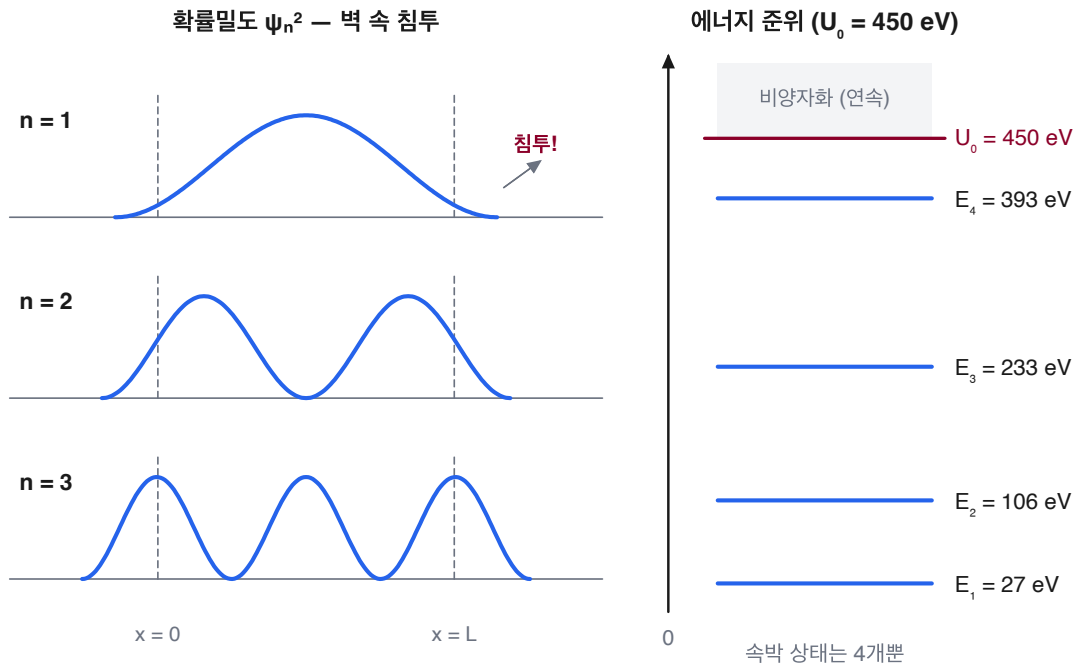
무한히 깊은 우물은 이상화이다. 실제 우물은 깊이가 유한한 값 U_0 이다. 이를 **유한 퍼텐셜 우물(finite potential well)** 이라 한다.

이제는 끈의 정상파 유비가 통하지 않는다 — 벽에서 파동함수가 꼭 0이 된다는 보장이 없기 때문이다. **슈뢰딩거 방정식(Schrödinger's equation)** 을 직접 풀어야 한다:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x)] \psi = 0$$

벽 속으로 스며드는 파동함수

$U_0 = 450 \text{ eV}$, $L = 100 \text{ pm}$ 인 유한 우물을 풀면:



- 파동함수가 벽 **안으로 침투(penetration)** 하여 지수적으로 감소한다
- 고전물리로는 절대 못 가는 영역에서 전자가 발견될 수 있다 (38장의 터널링과 같은 현상)
- n 이 클수록(에너지가 높을수록) 더 깊이 스며든다

유한 우물의 에너지 준위

파동이 벽으로 새어 나가면 그만큼 파장 λ 가 **길어진다**. $\lambda = h/\sqrt{2mE}$ 이므로 에너지는 **낮아진다**.

같은 $L = 100 \text{ pm}$ 에서 비교하면 ($U_0 = 450 \text{ eV}$):

n	무한 우물	유한 우물
1	37.7 eV	27 eV
2	151 eV	106 eV
3	339 eV	233 eV
4	603 eV	393 eV

- 유한 우물에는 **유한 개의 속박 상태만** 존재한다 (여기서는 4개)
- $E > U_0$ 이면 전자는 갇히지 않고, 에너지는 **비양자화(nonquantized)** — 연속적인 아무 값이나 가능

예제 4: 유한 우물 탈출하기

$U_0 = 450 \text{ eV}$, $L = 100 \text{ pm}$ 우물의 바닥상태($E_1 = 27 \text{ eV}$) 전자를 광자 하나로 겨우 탈출시키려면 파장이 얼마여야 할까?

탈출에 필요한 최소 에너지는 $U_0 - E_1 = 450 - 27 = 423 \text{ eV}$ 이므로:

$$\lambda = \frac{hc}{U_0 - E_1} = \frac{(6.63 \times 10^{-34})(3.00 \times 10^8)}{(423 \text{ eV})(1.60 \times 10^{-19} \text{ J/eV})} = \boxed{2.94 \text{ nm}}$$

파장 2.00 nm (더 큰 에너지)의 광자를 흡수하면? 광자 에너지는 $hc/\lambda = 622 \text{ eV}$. 탈출하고 남은 에너지는 자유 전자의 운동 에너지가 된다:

$$K = 622 - 423 = \boxed{199 \text{ eV}}$$

탈출한 전자는 더 이상 갇혀 있지 않으므로 **아무 에너지나** 가질 수 있다.

39.4 2차원·3차원 전자 트랩

나노결정: 크기가 색을 결정한다

반도체를 나노미터 크기 알갱이(**나노결정, nanocrystallite**)로 만들면, 각 알갱이가 전자를 가두는 퍼텐셜 우물이 된다.

$E_n = (h^2/8mL^2)n^2$ 에서 우물 폭 L 이 작아지면 준위 간격이 **커진다**. 광자를 흡수하려면 문턱 에너지 E_t 이상이 필요하므로, 문턱 파장은

$$\lambda_t = \frac{ch}{E_t}$$

- 알갱이가 **작을수록** $\rightarrow E_t$ 증가 $\rightarrow \lambda_t$ 감소
- 문턱보다 긴 파장은 흡수되지 않고 **산란** 되어 우리 눈에 보인다
- 같은 CdSe 가루라도: 큰 알갱이는 **빨강**, 작은 알갱이는 **노랑** 으로 보인다

양자점: 인공 원자

양자점(quantum dot) 은 반도체 공정으로 만든 인공 전자 트랩이다. 원자처럼 불연속 에너지 준위를 갖기에 "인공 원자"라 불린다.

- 반도체 박막을 절연층 사이에 끼운 샌드위치 구조 — 가운데 층이 우물이 된다
- 전압으로 전자를 한 개씩 넣고 뺄 수 있다 — 갇힌 전자 수를 제어
- **QLED 디스플레이** : 양자점 크기로 발광색을 정밀 조절 (작은 점 = 파랑, 큰 점 = 빨강)
- STM 탐침으로 금속 표면에 원자들을 원형으로 배열한 **양자 울타리(quantum corral)** 안에서도 전자 물질파의 물결무늬가 실제로 관측되었다

2차원 우물: 직사각 코랄

전자가 xy 평면의 직사각형 영역($L_x \times L_y$)에 갇히면, 물질파가 **두 방향 각각**에 대해 정상파 조건을 만족해야 한다. 양자수가 두 개(n_x, n_y) 필요하다:

$$\psi_{n_x, n_y} = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right)$$

에너지는 각 방향에 따로 갇혔을 때 에너지의 **합**이다:

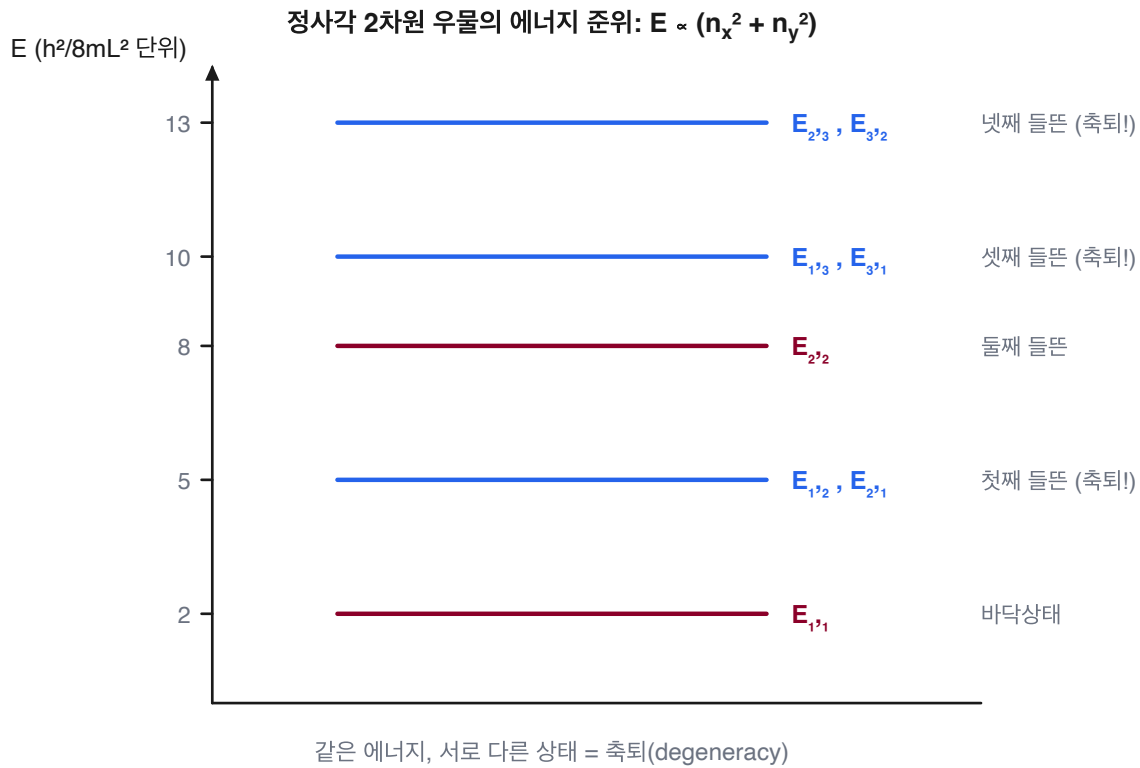
$$E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$$

n_x, n_y 는 각각 독립적으로 $1, 2, 3, \dots$ 값을 가진다.

정사각 우물과 축퇴

$L_x = L_y = L$ 인 정사각 우물에서는

$$E_{n_x, n_y} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$$



(1, 2)와 (2, 1)은 **서로 다른 상태**이지만 에너지는 같다. 이런 상태들을 **축퇴 (degenerate)** 되었다고 한다. 뜻밖에도 (1, 4) 상태(17)가 (3, 3) 상태(18)보다 에너지가 낮다.

3차원 상자

3차원 직육면체 상자($L_x \times L_y \times L_z$)에 가두면 양자수가 세 개:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

- 차원마다 정상파 조건 하나씩 $\rightarrow$ 양자수 하나씩
- 정육면체($L_x = L_y = L_z$)에서는 축퇴가 더 풍부해진다
- 광자 흡수·방출 규칙은 1차원과 동일: $hf = \Delta E$

예제 5: 정사각 우물의 준위 차

정사각 코랄에 갇힌 전자의 바닥상태와 셋째 들뜬상태의 에너지 차는? ($h^2/8mL^2$ 단위로)

낮은 준위부터 나열하면 ($n_x^2 + n_y^2$) 값은:

- 바닥상태 (1, 1): 2
- 첫째 들뜬 (1, 2), (2, 1): 5 — 둘째 들뜬 (2, 2): 8 — 셋째 들뜬 (1, 3), (3, 1): 10

$$\Delta E = 10 \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) - 2 \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) = \boxed{8 \frac{h^2}{8mL^2}}$$

축퇴된 준위는 하나의 준위로 세는 것에 주의하자.

39.5 수소 원자

수소 원자는 자연이 만든 전자 트랩

지금까지는 인공 트랩이었다. 이제 자연의 트랩 — **수소 원자** 를 보자. 전자는 양성자의 쿨롱 인력에 의해 갇혀 있다:

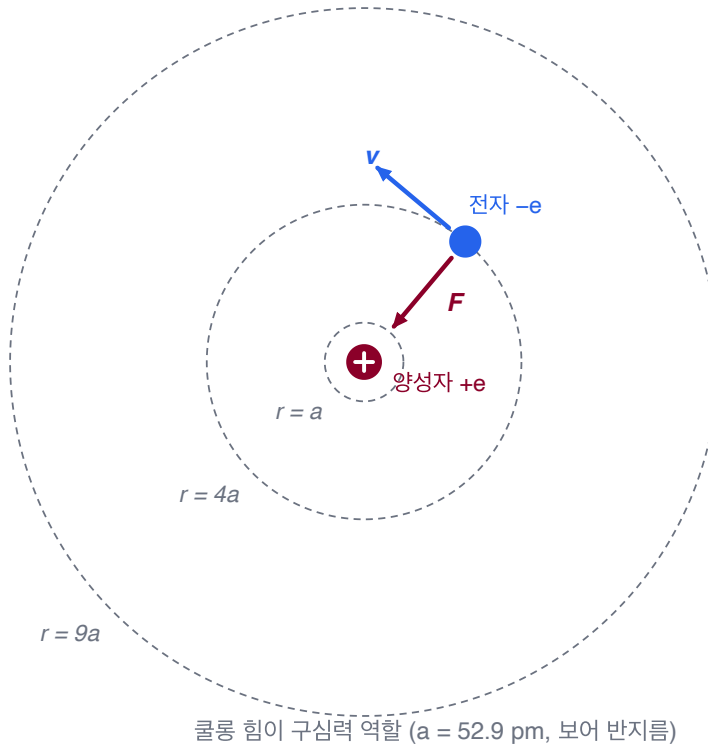
$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- 3차원이고, 깊이가 유한하고, 벽이 r 에 따라 서서히 변하는 트랩
- 20세기 초의 수수께끼: 수소는 가시광에서 **딱 네 가지 파장** (656, 486, 434, 410 nm)만 방출한다. 왜?
- 그리고 전자는 왜 양성자로 끌려 들어가 붕괴하지 않는가?

보어 모형 (1913)

닐스 보어는 두 가지 (당시로선 근거 없는) 대담한 가정을 세웠다.

보어 모형: 각운동량 양자화 $L = n\hbar \rightarrow$ 궤도 반지름 $r = an^2$



쿨롱 힘이 구심력 역할 ($a = 52.9 \text{ pm}$, 보어 반지름)

1. 전자는 양성자 주위를 **원운동** 한다 (행성 모형)
2. 각운동량이 양자화된다:

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi} \right)$$

이 모형은 수소의 에너지 준위는 정확히 맞췄지만, 그 외에는 거의 다 틀렸다. 그래도 역사적 출발점으로 따라가 볼 가치가 있다.

보어 반지름 유도 1: 뉴턴 제2법칙

원운동하는 전자에 작용하는 구심력은 쿨롱 힘이다. 반지름 방향으로 뉴턴 제2법칙을 쓰면:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

각운동량 양자화 조건 $L = mvr = n\hbar$ 에서:

$$v = \frac{n\hbar}{mr}$$

이제 v 를 뉴턴 제2법칙 식에 대입하면 r 만 남는다.

보어 반지름 유도 2: 궤도 반지름의 양자화

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m}{r} \left(\frac{n\hbar}{mr} \right)^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{mr^3}$$

양변에 r^3 을 곱하고 정리하면 ($\hbar = h/2\pi$):

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{me^2} = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} n^2 = a n^2$$

$$a = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m} \approx 52.9 \text{ pm}$$

a 를 **보어 반지름(Bohr radius)** 이라 한다. 전자는 이보다 안쪽 궤도를 가질 수 없다 — 원자가 붕괴하지 않는 이유(보어의 답).

에너지 양자화 유도

궤도의 역학적 에너지는 $E = K + U$:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

뉴턴 제2법칙 식에서 $mv^2 = e^2/4\pi\epsilon_0 r$ 이므로 $K = e^2/8\pi\epsilon_0 r$:

$$E = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

여기에 $r = an^2 = (h^2\epsilon_0/\pi me^2)n^2$ 을 대입하면:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

수소의 에너지 준위: -13.6 eV

상수 부분을 계산하면:

$$\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} = 13.6 \text{ eV}$$

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ (바닥상태), $E_2 = -3.40 \text{ eV}$, $E_3 = -1.51 \text{ eV}$, $\dots$, $E_\infty = 0$
- 에너지가 **음수**: 속박 상태라는 뜻. $E \geq 0$ 이면 전자가 풀려나 **이온화(ionization)** 된다
- 놀랍게도 슈뢰딩거 방정식을 제대로 풀어도 **같은 E_n** 이 나온다 — 보어의 행운

수소 스펙트럼: 리드버그 공식

준위 사이 전이에서 $hf = \Delta E$ 이므로, $f = c/\lambda$ 와 E_n 공식을 결합하면:

$$\frac{hc}{\lambda} = E_{\text{high}} - E_{\text{low}} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_{\text{low}}^2} - \frac{1}{n_{\text{high}}^2} \right)$$

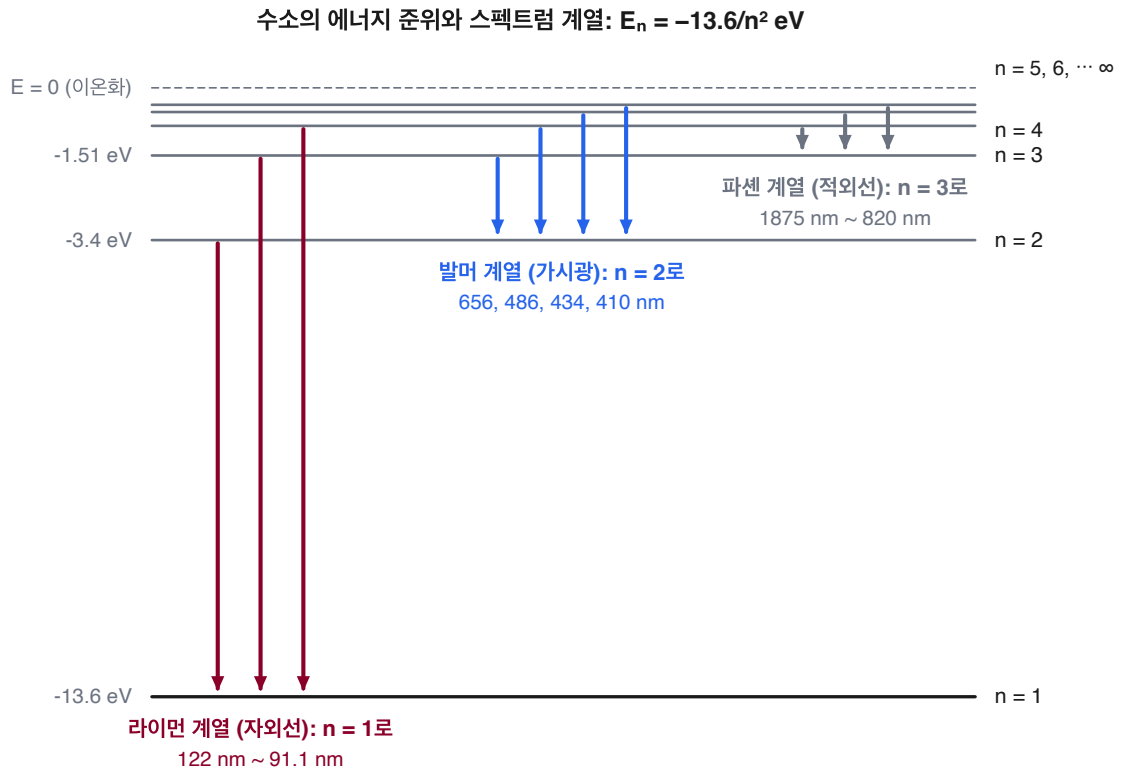
양변을 hc 로 나누면:

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_{\text{low}}^2} - \frac{1}{n_{\text{high}}^2} \right)}, \quad R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

R 는 **리드버그 상수(Rydberg constant)** 이다. 수소가 내고 삼키는 모든 빛의 파장이 이 한 줄에 담겨 있다.

스펙트럼 계열

아래 준위(n_{low})가 어디냐에 따라 스펙트럼선들이 **계열(series)**로 묶인다.



계열	n_{low}	파장 범위	영역
라이먼(Lyman)	1	91.1-122 nm	자외선
발머(Balmer)	2	365-656 nm	가시광
파셴(Paschen)	3	820-1875 nm	적외선

각 계열의 최단 파장을 **계열 한계(series limit)**라 한다 ($n_{\text{high}} = \infty$).

수수끼끼의 해결: 발머 계열

$n_{\text{low}} = 2$ 로 두고 $n_{\text{high}} = 3, 4, 5, 6$ 을 넣어 보자:

- $3 \rightarrow 2: \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) \Rightarrow \lambda = 656 \text{ nm}$ (빨강)
- $4 \rightarrow 2: \lambda = 486 \text{ nm}$ (청록) — $5 \rightarrow 2: \lambda = 434 \text{ nm}$ (파랑) — $6 \rightarrow 2: \lambda = 410 \text{ nm}$ (보라)

정확히 실험에서 관측된 네 가지 가시광 파장이다! 수십 년의 수수끼끼가 공식 하나로 풀렸다.

형광등·네온사인·나트륨 가로등의 색도 같은 원리 — 각 원소 고유의 준위 구조가 고유의 스펙트럼을 만든다. **형광(fluorescence)**은 높은 에너지 빛(자외선)을 흡수한 뒤 여러 단계로 나눠 내려오며 가시광을 방출하는 현상이다.

슈뢰딩거가 답한 수소 원자: 양자수

수소 원자를 슈뢰딩거 방정식으로 제대로 풀면, 상태 하나를 지정하는 데 **양자수 세 개**가 필요하다 (3차원이므로).

기호	이름	허용값
n	주양자수	$1, 2, 3, \dots$
ℓ	궤도 양자수	$0, 1, 2, \dots, n-1$
m_ℓ	궤도 자기 양자수	$-\ell, -(\ell-1), \dots, +(\ell-1), +\ell$

- 에너지는 n 만으로 결정: $E_n = -13.6/n^2$ eV $\rightarrow$ 같은 n 의 상태들은 **축퇴**
- 바닥상태($n = 1$)는 $\ell = 0, m_\ell = 0$: 각운동량이 **0** 이다. $L_1 = \hbar$ 라 했던 보어 모형은 여기서 틀렸다

바닥상태 파동함수

슈뢰딩거 방정식을 풀어 규격화한 수소 바닥상태의 파동함수는:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} e^{-r/a} \quad (a = 52.9 \text{ pm})$$

- 각도에 무관하고 r 에만 의존 $\rightarrow$ **구대칭(spherically symmetric)**
- $\psi^2(r) dV$ = 부피 요소 dV 에서 전자가 검출될 확률
- 전자는 궤도를 도는 것이 아니라, 확률 구름으로 퍼져 있다

반지름 r 근처에서 발견될 확률을 보려면 **방사 확률밀도**가 필요하다.

방사 확률밀도 $P(r)$ 유도

반지름 r 과 $r + dr$ 사이의 얇은 구 껍질을 부피 요소로 잡으면:

$$dV = 4\pi r^2 dr$$

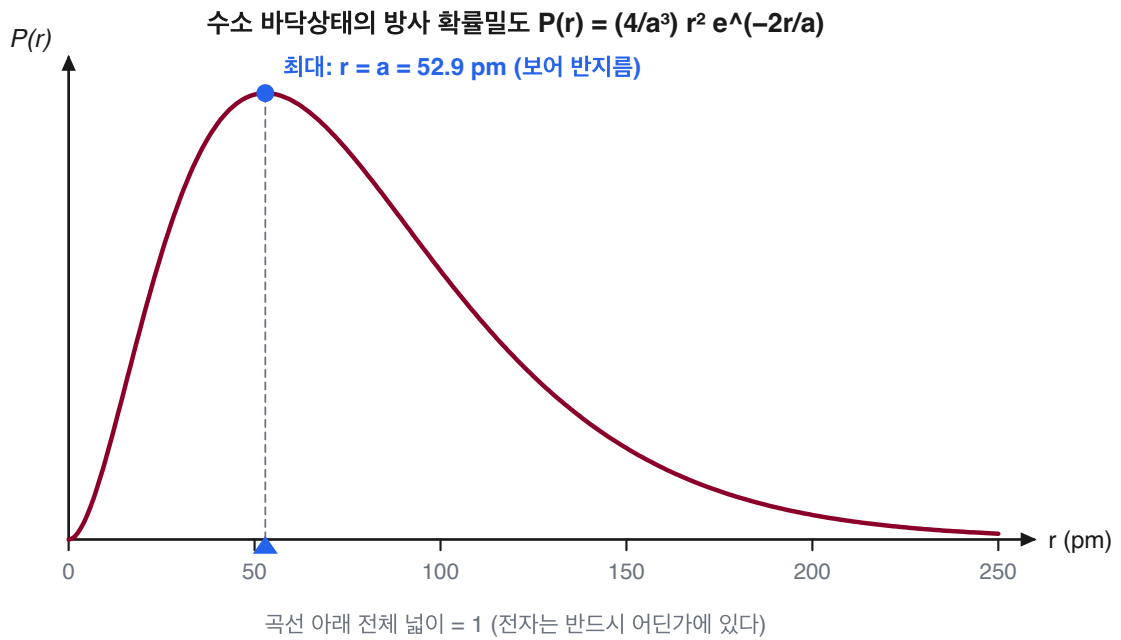
껍질에서 발견될 확률 $P(r) dr = \psi^2(r) dV$ 이므로:

$$P(r) = \psi^2(r) \cdot 4\pi r^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a} \cdot 4\pi r^2$$

$$\boxed{P(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2r/a}}, \quad \int_0^\infty P(r) dr = 1$$

r^2 (껍질 부피 증가)와 $e^{-2r/a}$ (밀도 감소)의 경쟁이 봉우리를 만든다.

$P(r)$ 의 최댓값은 $r = a$



미분해서 0이 되는 지점을 찾자:

$$\frac{dP}{dr} = \frac{4}{a^3} \left(2r e^{-2r/a} - \frac{2}{a} r^2 e^{-2r/a} \right) = \frac{8}{a^4} r (a - r) e^{-2r/a} = 0$$

$r = a$ 에서 최대. **전자가 가장 잘 발견되는 거리가 정확히 보어 반지름 $a = 52.9 \text{ pm}$** 이다. 보어의 "궤도 반지름"은 양자역학에서 "최빈 거리"로 의미가 바뀌어 살아남았다.

예제 6: 라이먼 계열의 파장

(a) 라이먼 계열에서 에너지가 가장 작은 광자의 파장은? 가장 작은 점프인 $2 \rightarrow 1$ 이다:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = (-3.40) - (-13.6) = 10.2 \text{ eV}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6.63 \times 10^{-34})(3.00 \times 10^8)}{(10.2)(1.60 \times 10^{-19})} = \boxed{122 \text{ nm}}$$

(b) 라이먼 계열 한계는? $n_{\text{high}} = \infty$ 이므로:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = R \Rightarrow \lambda = \frac{1}{R} = \boxed{91.1 \text{ nm}}$$

둘 다 자외선 영역이다 — 그래서 라이먼 계열은 눈에 보이지 않는다.

Review & Summary

핵심 개념

- **구속 원리** : 파동(물질파 포함)을 가두면 에너지가 양자화된다
- **무한 우물** : $E_n = (h^2/8mL^2)n^2$, $\psi_n = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$
- **광자 흡수·방출** : $hf = hc/\lambda = \Delta E$ — 준위 차와 정확히 같아야 한다
- **유한 우물** : 파동함수가 벽에 침투 → 준위가 낮아지고 유한 개만 존재
- **2·3차원 트랩** : 차원마다 양자수 하나씩, 같은 에너지의 다른 상태 = **축퇴**
- **수소 원자** : $E_n = -13.6/n^2$ eV, 스펙트럼은 리드버그 공식으로

핵심 공식

개념	공식
무한 우물 에너지	$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$
규격화된 파동함수	$\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$
광자 전이 조건	$hf = hc/\lambda = \Delta E$
2차원 우물	$E = \frac{h^2}{8m} (n_x^2/L_x^2 + n_y^2/L_y^2)$
수소 에너지 준위	$E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$
리드버그 공식	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_{\text{low}}^2} - \frac{1}{n_{\text{high}}^2} \right)$

기억할 것 : 보어 반지름 $a = 52.9 \text{ pm}$ — 바닥상태 수소에서 전자가 가장 잘 발견되는 거리이며, $P(r) = (4/a^3)r^2e^{-2r/a}$ 의 봉우리이다.