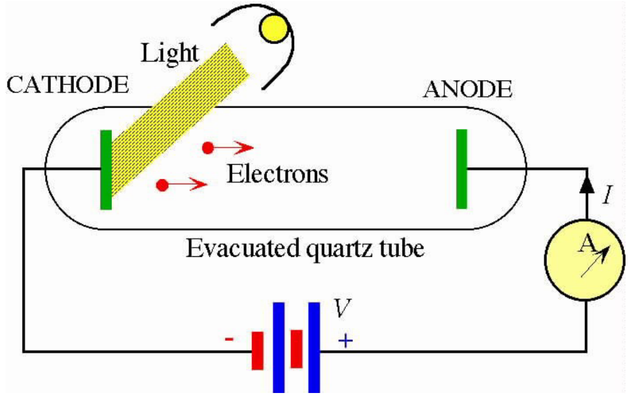
2.1 양자역학의 원리

2.1.1 에너지 양자(energy quanta)

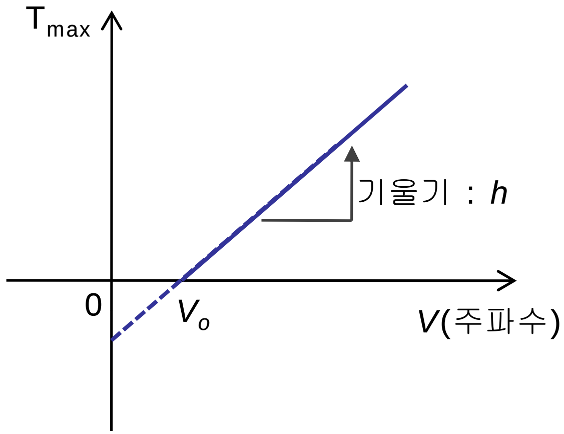
□ 光電효과(photoelectric effect)

✓ 충분히 높은 주파수의 빛이
금속 표면에 쪼여질 때,
금속 표면에서 전자가 방출되는 현상



<광전효과 실험장치>

✓ 광전효과에 의해 방출되는 전자의 energy는 빛의 주파수에 의해서만 결정됨



$$T_{max} = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - h\nu_o \quad (\nu > \nu_o)$$

T_{max} : 전자의 최대 운동에너지
m : 전자의 질량
v : 전자의 속도
h : Planck 상수(≈6.63 x 10^{-34} [J sec])
$h\nu_o$: work function [J]

2.1.2 波動과 粒子의 이중성(Wave-Particle Duality)

① 고전적 파동(wave)은 양자화(quantized)된 에너지를 가지며,
에너지의 각 양자(quantum)는 입자(particle)로 고려될 수 있다.
(예) 빛, 광파 ⇒ photon(光量子, 光子)
음파 ⇒ phonon

② 고전적 입자는 에너지와 파장을 갖는 파동으로 고려될 수 있다.

2.1.3 Heisenberg의 不確定性 원리(Uncertainty Principle)

① 입자의 위치(r)와 운동량(p)에 관한 정확한 측정을 동시에 수행할 수 없으며,
이들 2가지의 물리량에 관한 불확실성은

$$(\Delta p)(\Delta x) \geq \hbar$$

로 주어진다.

② 에너지(E) 측정에 있어서의 불확실성은 그 측정이 이루어지는 시간(t)에 관한 불확실성에 대해서

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \hbar$$

로 주어진다.

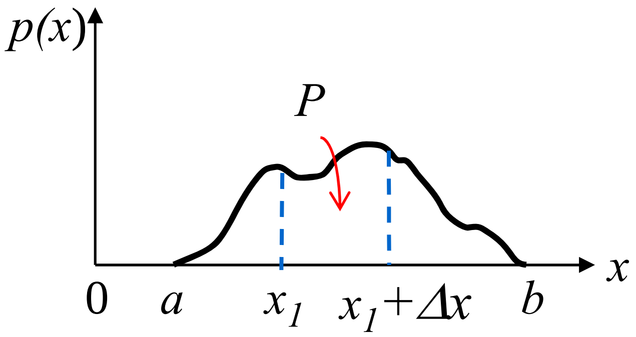
✓ 자연현상의 확률론적 기술

전자와 같은 입자들은 그 위치, 운동량, 에너지 등이 확정적으로 기술되지 못한다.

✓ 확률밀도함수(Probability Density Function, PDF),

확률분포함수(Probability Distribution Function, PDF)

¶ PDF의 정의



$x_1 \sim x_1 + \Delta x$ 사이에서의 확률 : $P = \int_{x_1}^{x_1+\Delta x} p(x)dx$

$a \sim b$ 사이의 총 확률 : $P_{ab} = \int_a^b p(x)dx$

이 때, 단위 구간 당 확률의 크기를 나타내는 함수, $p(x)$, 를 '확률밀도함수' 라고 한다.

¶ 일반화 $\int_{x_1}^{x_1+\Delta x} p(x)dx = P$: $(x_1 \sim x_1 + \Delta x)$ 사이의 확률값

$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1$: normalization (총 확률은 항상 1)

¶ PDF를 이용한 어떤 함수, $f(x)$, 의 평균값 계산

$$< f(x) > = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)p(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)p(x)dx$$

2.2 Schrödinger의 파동방정식

□ 기본 가정

① 물리학적 시스템에서의 각 물리량은 wave function, $\Psi(x,y,z,t)$, 로 기술될 수 있다. 또한 이 함수와 그 공간에 대한 도함수, $\nabla\Psi$, 는 연속이고 유한하며 유일하다.

② 고전 물리학적 개념의 여러 가지 물리량은 양자역학적인 operator로 바꿀 수 있다.

물리량	고전적 변수	양자역학적 operator
거리, 위치	$\vec{r}$ 또는 (x,y,z)	(x,y,z)
함 수	$f(x,y,z)$	$f(x,y,z)$
운동량	$p(x,y,z)$	$\frac{\hbar}{j}\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}\right)$
에너지	E	$-\frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial t}$

③ 미소체적 $dxdydz$ 내에서 wave function, Ψ, 에 의해 주어지는 입자를 발견할 확률은 $\Psi^*\Psi\, dxdydz$ 또는 $|\Psi|^2\, dxdydz$ 로 주어진다.

또한, $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2 dxdydz\ =1$: 입자가 어딘가에 존재

$=0$: 입자는 그 체적 내에 존재하지 않음

□ 1차원 비상대성 Schrödinger 방정식

파동-입자 이중성 원리를 바탕으로 결정 내에서 전자의 운동을 파동이론으로 표현한 것

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x}+V(x)\Psi(x)=jh\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

- $\Psi(x,t)$: 파동함수
- $V(x)$: 시불변 전위함수
- m : 입자의 질량
- $j=\sqrt{-1}$

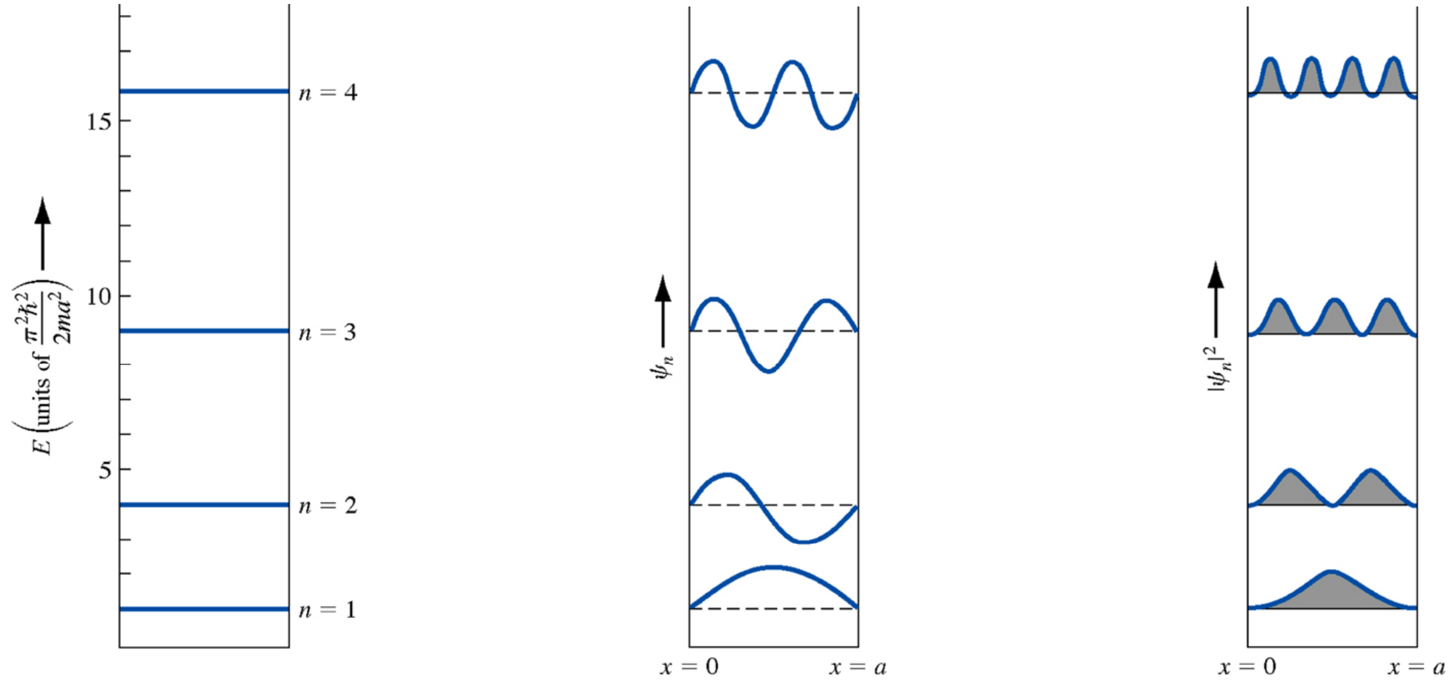
□ 파동함수의 물리적 의미

Ψ 자체에는 어떤 직접적인 물리적 의미가 포함되어 있지 않다.

다만, 특정된 시간에 특정한 위치에서 계산된 $|\Psi|^2$가
그 시각에 어떤 물체를 그 위치에서 실험적으로 발견해낼 **확률**과 비례한다.

따라서 $|\Psi|^2$는 음수(negative)나 복소수(complex)가 될 수 없다.

□ Potential Well Problem의 결과



(a) 전자의 에너지, E (b) 파동함수, $\psi(x)$ (c) 확률밀도함수, $|\psi|^2$

□ Pauli's Exclusion Principle(파울리의 배타원리)

-. 하나의 물리적 시스템 속에 여러 개의 전자가 존재할 경우,
이들 전자가 가지게 되는 quantum state들은 모두 서로 달라야 한다는 것을 의미.

즉, "하나의 원자 속에 있는 전자들은 절대 서로 동일한 양자상태(**quantum state**) 에 있을 수 없다."

-. 따라서 모든 전자는 quantum state를 나타내주는 4가지 量子數(quantum number) 중 어느 하나라도 달라야 한다.

-. 따라서 아래 그림과 같은 energy level을 갖는 물리적 시스템의 경우,
배타원리를 고려하지 않으면 8개의 전자는 왼쪽 그림과 같이 하나의 energy level에 존재할 수 있으나, 실제로는 배타원리에 의해 오른쪽 그림과 같이 하나의 level에는 spin 양자수가 다른 2개의 전자만이 존재할 수 있게 된다.